

T H È S E S

présentées à la

**FACULTE DES SCIENCES D'ORSAY
UNIVERSITE DE PARIS**

pour obtenir le grade de

DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

Jacques **VIEILLARD-BARON**

1ère Thèse

LES TRANSITIONS DE PHASE DU SYSTEME D'ELLIPSES DURES CLASSIQUE

2ème Thèse : Propositions données par la Faculté

Soutenues le 1er Juin 1970 devant la Commission d'Examen

MM. J. YVON

Président

P.G. DE GENNES)
B. JANCOVICI)
L. VERLET)

Examineurs

T H È S E S

présentées à la

**FACULTE DES SCIENCES D'ORSAY
UNIVERSITE DE PARIS**

pour obtenir le grade de

DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

Jacques VIEILLARD-BARON

1ère Thèse

LES TRANSITIONS DE PHASE DU SYSTEME D'ELLIPSES DURES CLASSIQUE

2ème Thèse : *Propositions données par la Faculté*

Soutenues le 1er Juin 1970 devant la Commission d'Examen

MM. J. YVON

Président

P.G. DE GENNES)

B. JANCOVICI)

L. VERLET)

Examineurs



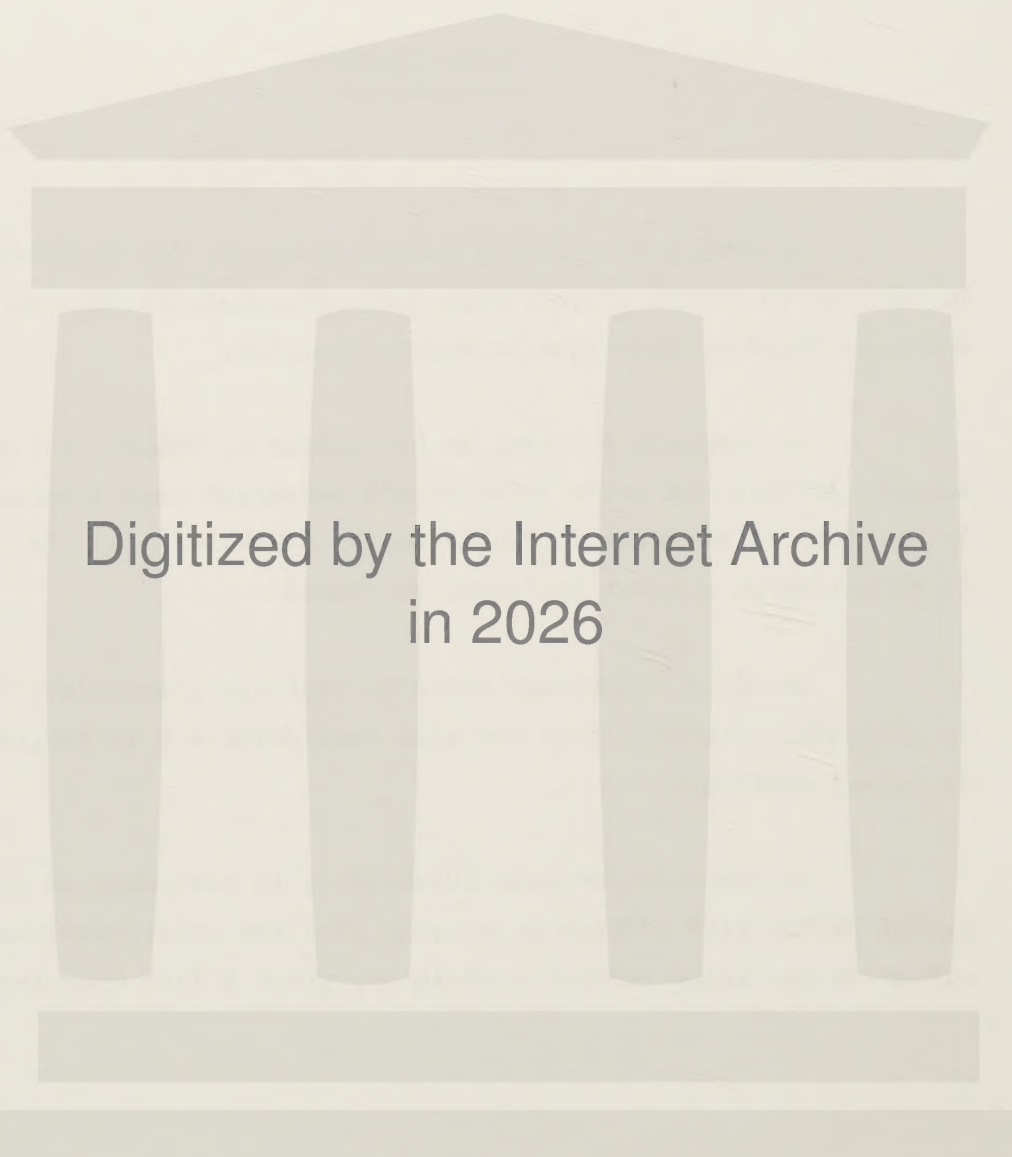
REMERCIEMENTS

Je suis reconnaissant envers Messieurs les Professeurs M. LEVY et Ph. MEYER d'avoir bien voulu m'accueillir dans le Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies.

Je remercie Monsieur le Professeur L. VERLET, qui m'a suggéré le sujet de cette thèse et m'a encouragé dans l'exécution de ce travail, et Monsieur le Professeur B. JANCOVICI, qui m'a initié à la recherche et a suivi également ce travail.

Je tiens à exprimer toute ma profonde gratitude à Monsieur D. LEVESQUE, notamment pour son aide considérable à la programmation du calcul numérique.

Je remercie Monsieur JOHANNIN et le personnel du Centre de Calcul UNIVAC 1108 d'Orsay de m'avoir facilité considérablement l'exécution de ces longs calculs numériques, grâce à leur dynamisme.



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41552004_0005

TABLE DES MATIERES

<u>Introduction</u>	1
<u>I - La fonction de contact</u>	10
A - La fonction de contact de deux ellipses égales	10
B - Le polynôme caractéristique	11
C - Propriétés caractérisant les configurations d'un couple d'ellipses	14
D - Equivalence des deux types de propriétés caractéristiques.	16
E - Etude des racines du polynôme caractéristique	18
F - Comparaison de la fonction de contact des ellipses à celle de leurs grands cercles	22
G - Fonction de contact de deux ellipsoïdes de révolution égaux	23
<u>II - Propriétés du système à très haute densité</u>	26
A - Les états d'empilement maximum	26
B - Application de la théorie du volume libre	29
C - Déplacements anormalement grands à densité très élevée . .	39
<u>III - Le calcul de Monte-Carlo</u>	52
A - Détermination de la pression	52

B - Autres aspects techniques du calcul	56
C - Difficultés rencontrées dans le cas des ellipsoïdes durs.	58
 <u>IV - Les deux transitions de phase</u>	 61
A - La fusion	61
B - La transition nématique-liquide	64
C - Etats du système aux faibles et aux très grands allongements	69
 <u>Conclusion</u>	 72
 <u>Appendice 1</u> . Minimum de la fonction de contact des ellipses pour r fixé ($r \geq 2a$)	 75
 <u>Appendice 2</u> . Détermination de la fonction de contact des ellipsoïdes	 81
 <u>Appendice 3</u> . Valeurs de Ψ quand les grands axes des ellipses sont parallèles	 96
 <u>Appendice 4</u> . Le signe de $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Psi$ dans le cas du contact extérieur	 98
 <u>Références</u>	 100
 <u>Légendes des Figures</u>	 102
 <u>Figures n^{os} 1 à 6</u>	 104

I N T R O D U C T I O N

L'intérêt du système d'ellipses dures est de représenter raisonnablement un cristal liquide [1] de type nématique ; on sait que, dans la nature, le système formé par certaines molécules allongées présente trois états de symétrie différente : entre les phases solide et liquide se situe une phase intermédiaire, dite nématique, dans laquelle les molécules, dont les centres de gravité sont désordonnés, possèdent un ordre directionnel.

Une transition de phase du premier ordre sépare l'état nématique de l'état liquide. On est tenté de penser que cette transition est due avant tout à des facteurs géométriques, comme le suggère la théorie d'Onsager [2], dont nous allons maintenant rappeler brièvement les grandes lignes.

Considérons un système composé de N molécules identiques possédant chacune un axe de symétrie de révolution. En partageant la sphère unité en un très grand nombre s de parties distinctes $\Delta\Omega_1, \Delta\Omega_2, \dots, \Delta\Omega_s$, nous définissons s directions possibles des axes des molécules, $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_s$. Onsager considère le système comme le mélange de s constituants,

la jème partie du mélange contenant les N_j molécules dont l'axe a la direction Δ_j . Cet auteur cherche les valeurs des proportions N_j/N qui rendent l'énergie libre du système $F(N_1, N_2, \dots, N_s; \rho, T)$ minimum (à densité ρ et température T fixées), et obtient ainsi la fonction de distribution des orientations des diverses molécules à l'équilibre.

L'énergie libre $F(N_1, N_2, \dots, N_s; \rho, T)$ est essentiellement la somme de l'énergie libre $F_d(N_1, N_2, \dots, N_s; \rho, T)$ calculée en supposant que les molécules sont discernables (et possèdent une orientation déterminée), et de l'énergie libre de mélange $F_m(N_1, N_2, \dots, N_s; T)$, indépendante du potentiel d'interaction des molécules (et de la densité). Pour évaluer F_d , Onsager utilise le développement du viriel jusqu'au deuxième ordre ; (seuls interviennent les deux premiers coefficients de la série du viriel).

Pour étudier l'influence des effets d'encombrement dans la transition de désorientation présentée par les cristaux liquides nématiques, Onsager a considéré le cas des molécules rigides ; (la température ne joue donc pratiquement aucun rôle ici). A faible densité, la distribution isotrope, (dans laquelle $\frac{N_j}{N} \Delta \Omega_j$ est indépendant de j), est la seule distribution qui rende l'énergie libre $\frac{1}{N} F(N_1, \dots, N_s; \rho, T)$ extrême par rapport aux variations des proportions N_j/N ; la phase isotrope est donc stable. A suffisamment haute densité, une autre distribution rend l'énergie libre par molécule stationnaire et inférieure à la valeur de F/N associée à la phase isotrope : l'état stable du système est anisotrope.

En appliquant la théorie d'Onsager, Isihara [14] a déterminé les densités correspondant à la transition de désorientation présentée par des molécules rigides (identiques) ayant la forme d'ellipsoïdes ou de cylindres de révolution. Zwanzig [3] a étudié le système composé de molécules ayant la forme de parallélépipèdes rectangles infiniment longs et minces, pouvant prendre trois orientations, suivant les axes de coordonnées.

Plus précisément désignons par d la longueur des côtés de la base carrée de chaque parallélépipède et par ℓ sa hauteur. Dans la limite où $\ell \rightarrow +\infty$ et $d \rightarrow 0$ de façon que le produit $\ell^2 d$ reste égal à une constante positive, (le volume de chaque molécule tend alors vers zéro), Zwanzig a pu calculer jusqu'au septième ordre les coefficients du viriel intervenant dans le développement de $F_d(N_1, N_2, \dots, N_s; \rho, T)$. A chaque ordre d'approximation de la série du viriel, Zwanzig observe une boucle de Van der Waals associée à la transition de désorientation des parallélépipèdes.

Mais le modèle de Zwanzig est très artificiel, car le volume de chaque parallélépipède est nul tandis que sa longueur ℓ est infinie. D'autre part les densités de transition dépendent très fortement de l'ordre d'approximation considéré. En particulier, la boucle de Van der Waals et la transition manquent disparaître quand on utilise tous les coefficients du viriel d'ordre inférieur ou égal à six.

A l'aide de calculs de Monte-Carlo dans l'ensemble canonique [4], nous avons mis en évidence l'existence de deux transitions de phase

du premier ordre, dans un système (à deux dimensions) composé de 170 ellipses dures allongées, dont le rapport des axes vaut 6, se heurtant élastiquement les unes contre les autres :

Une transition ordre-désordre pour les centres de gravité, comme dans le cas des disques durs [5] , à haute densité, et une transition ordre-désordre portant sur l'orientation, à une densité environ 1,5 fois plus faible. A densité élevée, les grands axes des ellipses pointent en moyenne dans la même direction ; à plus basse densité, les ellipses peuvent tourner et d'ordre directionnel se détruit.

Nous remarquons que cet ordre angulaire, comme l'ordre solide, ne se maintient sans doute pas à grande distance, dans ce système continu à deux dimensions [6] , quand le nombre N d'ellipses devient très grand. C'est un ordre à moyenne distance concernant quelques centaines d'ellipses voisines.

Nous rappelons que le calcul de Monte-Carlo [4] , permettant en particulier de déterminer l'équation d'état, consiste ici essentiellement à engendrer une suite de configurations successives du système d'ellipses suivant une chaîne de Markov et à évaluer, le long de cette chaîne, les moyennes de grandeurs dépendant seulement des positions des ellipses, telles que la fonction de paire, le facteur de structure, ou la pression. Si nous choisissons convenablement les probabilités de passage d'une configuration à une autre, ces moyennes, quand la chaîne de Markov devient infiniment longue, tendent vers les moyennes correspondantes

associées au système dans son état d'équilibre, à la densité et à la température considérées. (En fait, la température ne joue pratiquement aucun rôle dans le cas où la seule interaction entre les molécules est infiniment répulsive).

A chaque étape de la chaîne, par une méthode que nous décrivons au paragraphe III-B, nous déplaçons "au hasard" l'une des ellipses. Nous prenons la nouvelle configuration ainsi engendrée si les ellipses ne s'y rencontrent pas. Nous la rejetons dans le cas contraire, en gardant l'"ancienne" configuration.

Pour sélectionner les nouvelles configurations permises, nous devons donc avant tout trouver un moyen simple et rapide permettant de voir si deux ellipses, dont on connaît la position des centres et l'orientation des grands axes, ne se rencontrent pas. La résolution de ce problème est l'objet du chapitre I, où nous indiquons aussi les résultats obtenus dans la résolution du problème correspondant relatif aux ellipsoïdes de révolution. L'étude des systèmes composés d'ellipsoïdes durs de révolution permettrait certainement d'observer des différences notables entre les phases présentées respectivement par des ellipsoïdes allongés suivant leur axe de révolution et par des ellipsoïdes aplatis, les sphères dures étant situées entre ces deux espèces d'ellipsoïdes. D'autre part, la "fonction de contact" des ellipses, déterminée au chapitre I, nous permettra de calculer la pression.

Dans le deuxième chapitre, nous étudions le comportement du système d'ellipses dures à très haute densité. Au paragraphe II-A, nous

montrons que ce système possède une infinité continue d'états de même densité maximum, ne se déduisant pas les uns des autres par déplacement. Dans les paragraphes II-B et II-C, nous étudions le comportement asymptotique de la pression P quand l'aire A de la boîte contenant les ellipses tend vers sa valeur minimum A_0 . Plus précisément, quand $A \rightarrow A_0$, le facteur de compressibilité se comporte de la manière suivante, (nous désignons par k la constante de Boltzmann) :

$$\frac{P A}{N k T} = \frac{\nu}{\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)} (1 + \varepsilon) ,$$

ν étant une constante que nous voulons déterminer, ($\varepsilon \rightarrow 0$).

Au paragraphe II-B, nous démontrons que la théorie du volume libre, appliquée aux ellipses dures, donne la valeur $\nu = 3$, indépendante du rapport des axes a/b et de l'état d'empilement maximum, alors que la valeur correspondante de ν est 2 dans le cas des disques durs [9]. En effet, aux deux degrés de liberté de translation du centre de chaque molécule, on doit ajouter le degré de liberté de rotation dans le cas des ellipses ; quand l'aire A tend vers A_0 , les variations de ces degrés de liberté sont des infiniment petits du même ordre que la variation des dimensions de la boîte, c'est-à-dire que $\frac{A}{A_0} - 1$.

Au paragraphe II-C, nous étudions directement le comportement asymptotique de la pression P dans le cas où le système comprend N ellipses dures enfermées dans une boîte compatible avec l'un des états d'empilement maximum, compte tenu des conditions aux limites périodiques. Avec

ces conditions aux limites, $\nu = 2 - \frac{2}{N}$ dans le cas de N disques durs [9] ; le terme $2/N$ est dû à l'invariance du système de disques dans une translation globale, qui diminue de deux unités le nombre total $2N$ de degrés de liberté effectifs du système.

Dans le paragraphe II-C, pour certains types de réseaux solides, nous démontrons l'existence de plusieurs "directions" privilégiées le long desquelles l'amplitude maximum de l'ensemble des déplacements des ellipses, à partir de leurs positions respectives sur le réseau solide, est un infiniment petit d'ordre au plus égal à celui de

$$\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^{\frac{1}{2}}, \text{ tandis que cette amplitude maximum est du même ordre } \text{ que } \frac{A}{A_0} - 1 \text{ dans la plupart des directions.}$$

Le nombre des directions privilégiées indépendantes est de l'ordre de $\sqrt{N}$ aux grandes valeurs de N , alors que le nombre total de degrés de liberté effectifs du système d'ellipses est $3N - 2$, compte tenu de l'invariance par translation. Ces déplacements anormalement grands des ellipses, dans les directions privilégiées, abaissent la pression à très haute densité, et diminuent certainement le nombre $\nu = 3$, donné par la théorie du volume libre, d'une quantité $\Delta \nu$ qui est de l'ordre de $1/\sqrt{N}$, pour un rapport des axes a/b et une forme de boîte fixés.

Dans le troisième chapitre, nous décrivons les aspects techniques du calcul de Monte-Carlo. Au paragraphe III-A, nous exposons notre méthode d'évaluation de la pression, à l'aide de la fonction de contact des ellipses, déterminée au chapitre I. Dans le paragraphe III-B, nous

décrivons notamment comment nous engendrons les configurations successives du système d'ellipses, au cours du calcul. Au paragraphe III-C, nous indiquons les difficultés importantes restant à surmonter dans la détermination de la pression d'un système composé d'ellipsoïdes durs.

Dans le quatrième et dernier chapitre, nous décrivons principalement les transitions solide-nématique et nématique-liquide du système constitué par 170 ellipses dures dont le rapport des axes a/b vaut 6. (La boîte contenant ces ellipses est presque carrée).

Comme nous le verrons au paragraphe IV-A, la fusion commence à une aire A_f/A_0 d'autant plus basse que l'allongement a/b des ellipses est plus grand, pour un nombre N d'ellipses et une forme de boîte à peu près fixes. Dans le cas où $a/b = 6$ et $N = 170$, l'aire A_f/A_0 est inférieure à 1,15, tandis qu'elle vaut déjà 1,266 pour un système composé de 870 disques durs [5] .

La transition nématique-liquide, qui est aussi du premier ordre, est décrite au paragraphe IV-B. Quand $a/b = 6$ et $N = 170$, elle commence à l'aire $A/A_0 = 1,775 \pm 0,025$. Il nous a été très difficile de localiser la boucle de Van der Waals associée à cette transition, à cause de l'écart très faible séparant les branches nématique et liquide de l'isotherme et de la très petite valeur de l'entropie de désorientation $\Delta S/Nk$, qui est trois à sept fois plus faible que l'entropie de fusion des disques durs [5] , égale à 0,36. Ces très petites valeurs sont essentiellement dues au fait qu'un seul degré de liberté par ellipse entre en jeu dans la désorientation, au lieu de deux dans la fusion.

Dans le dernier paragraphe (numéro IV-C), nous décrivons brièvement les états du système d'ellipses aux faibles et aux très grands allongements.

I - LA FONCTION DE CONTACT

A - LA FONCTION DE CONTACT DE DEUX ELLIPSES EGALES

Dans le calcul de Monte-Carlo, pour sélectionner les configurations permises, nous devons connaître avant tout la condition de contact de deux ellipses égales, E_1 et E_2 , dont les vecteurs unitaires des grands axes sont $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ et le vecteur joignant les centres O_1 et O_2 est $\vec{r} = \vec{O_1O_2}$. En plus la fonction de contact correspondante nous permettra de déterminer la pression et d'étudier le comportement du système à très haute densité.

Désignons par a le demi-grand axe des ellipses et par b leur demi-petit axe. Soient $\vec{u}'_1$ et $\vec{u}'_2$ les vecteurs unitaires respectivement orthogonaux à $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$, et θ l'angle formé par les axes : $\theta = (\vec{u}_1, \vec{u}_2)$. Dans ce chapitre, nous allons prouver le lemme suivant :

Lemme 1 -

Pour que les ellipses E_1 et E_2 soient tangentes (intérieurement ou extérieurement), il faut et il suffit que la fonction $\Psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2 ; a, b)$ suivante soit nulle :

$$\Psi = 4 (f_1^2 - 3f_2) (f_2^2 - 3f_1) - (9 - f_1 f_2)^2 \quad (\text{I, 1 a}),$$

f_α ($\alpha = 1$ ou 2) étant la fonction suivante de $\vec{r}$, $\vec{u}_1$, $\vec{u}_2$, a et b :

$$f_\alpha = 1 + G - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{u}_\alpha)^2}{a^2} - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{u}'_\alpha)^2}{b^2} \quad (\text{I, 1 b}),$$

définie par l'intermédiaire de :

$$G = 2 + \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a} \right)^2 \sin^2 \theta \quad (\text{I, 1 c}).$$

Nous appellerons $\Psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b)$ la fonction de contact.

En outre, nous allons démontrer la proposition suivante :

Lemme 2 -

Pour que les ellipses E_1 et E_2 n'aient aucun point réel commun, il faut et il suffit que la fonction de contact Ψ soit positive et que l'une au moins des fonctions f_1 et f_2 soit négative.

Cette dernière condition, quand Ψ est nulle, peut servir à distinguer le contact extérieur du contact intérieur.

B - LE POLYNÔME CARACTERISTIQUE

Les ellipses E_1 et E_2 , considérées au paragraphe précédent, se coupent toujours en quatre points M_1, M_2, M_3 et M_4 , réels ou imaginaires, distincts ou confondus. Dans un système de coordonnées cartésiennes Oxy , nous voulons déterminer les équations des trois coniques dégénérées

C_1 , C_2 et C_3 , formées respectivement par les couples de droites joignant ces points deux à deux : (M_1M_2, M_3M_4) , (M_1M_3, M_2M_4) et (M_1M_4, M_2M_3) .

Les équations des ellipses E_1 et E_2 s'écrivent :

$F_1(M) = 0$ et : $F_2(M) = 0$, $F_1(M)$ et $F_2(M)$ étant des polynômes du second degré par rapport aux coordonnées cartésiennes x et y du point courant M .

Considérons alors le faisceau de coniques [7] engendré par les ellipses E_1 et E_2 , c'est-à-dire toutes les coniques $C(\lambda)$ d'équation :

$$F(M; \lambda) = F_1(M) + \lambda F_2(M) = 0 \quad (I, 2),$$

où λ est un paramètre complexe variable. Les équations (I, 2) sont celles de toutes les coniques passant par les points M_1, M_2, M_3, M_4 ; (une conique est complètement déterminée par cinq points).

Les coniques dégénérées du faisceau sont justement les couples de droites C_1, C_2 et C_3 définis plus haut. Les valeurs de λ correspondantes - λ_1, λ_2 , et λ_3 - s'obtiennent en annulant le déterminant de la conique $C(\lambda)$. λ_1, λ_2 et λ_3 sont les racines du polynôme "caractéristique" $P(\lambda)$ du troisième degré, que nous allons maintenant déterminer.

Nous utilisons les notations du paragraphe A précédent. Nous prenons l'origine O au milieu du segment O_1O_2 et, dans le cas où O_1 et O_2 sont distincts, nous choisissons les vecteurs de base orthogonaux $\vec{j}$ et $\vec{k}$ ainsi définis :

$$\vec{j} = \frac{1}{2} \vec{O_1O_2}, \quad \vec{j} \cdot \vec{k} = 0, \quad k^2 = j^2 \quad (I, 3).$$

Soit M le point courant :

$$\vec{OM} = x \vec{j} + y \vec{\ell} \quad (\text{I, 4}).$$

Si nous posons ($\alpha = 1$ ou 2) :

$$K = \frac{b^2}{a^2} - 1 \quad (\text{I, 5 a})$$

$$A_\alpha = j^2 + K (\vec{j} \cdot \vec{u}_\alpha)^2 \quad (\text{I, 5 b})$$

$$B_\alpha = K (\vec{j} \cdot \vec{u}_\alpha) (\vec{\ell} \cdot \vec{u}_\alpha) \quad (\text{I, 5 c})$$

$$C_\alpha = \ell^2 + K (\vec{\ell} \cdot \vec{u}_\alpha)^2 \quad (\text{I, 5 d}),$$

l'équation de l'ellipse E_α s'écrit : $F_\alpha(M) = 0$, avec :

$$F_\alpha(M) = O_\alpha M^2 + K(O_\alpha \vec{M} \cdot \vec{u}_\alpha)^2 - b^2 \quad (\text{I, 6 a}),$$

ou :

$$\begin{aligned} F_\alpha(M) = A_\alpha x^2 + 2 B_\alpha xy + C_\alpha y^2 \\ + (-1)^{\alpha+1} 2 (A_\alpha x + B_\alpha y) + A_\alpha - b^2 \end{aligned} \quad (\text{I, 6 b}).$$

Pour trouver les coniques dégénérées C_1 , C_2 et C_3 du faisceau, nous annulons le déterminant $\Delta(\lambda)$ de la conique $C(\lambda)$ définie par l'équation (I, 2). La relation (I, 6 b) nous permet de construire ce déterminant :

$$\Delta(\lambda) = \begin{vmatrix} A_1 + \lambda A_2 & B_1 + \lambda B_2 & A_1 - \lambda A_2 \\ B_1 + \lambda B_2 & C_1 + \lambda C_2 & B_1 - \lambda B_2 \\ A_1 - \lambda A_2 & B_1 - \lambda B_2 & A_1 + \lambda A_2 - (1+\lambda)b^2 \end{vmatrix} \quad (\text{I, 7}).$$

A l'aide des égalités (I, 5), (I, 3) et (I, 1 c), nous vérifions les identités suivantes ($\alpha = 1$ ou 2) :

$$D_{\alpha} = A_{\alpha} C_{\alpha} - B_{\alpha}^2 = \frac{b^2}{a^2} j^4 \quad (\text{I, 8 a})$$

$$G = (A_1 C_2 + A_2 C_1 - 2B_1 B_2) / D_{\alpha} \quad (\text{I, 8 b}).$$

En développant le déterminant $\Delta(\lambda)$, en le divisant par $-b^2 D_{\alpha}$ et en utilisant les relations (I, 8), (I, 5), (I, 3) et (I, 1 b), nous obtenons le polynôme caractéristique :

$$P(\lambda) = \lambda^3 + f_1 \lambda^2 + f_2 \lambda + 1 \quad (\text{I, 9}),$$

dont les trois racines λ_1 , λ_2 et λ_3 correspondent aux couples de droites C_1 , C_2 et C_3 joignant les points d'intersection M_1 , M_2 , M_3 et M_4 des ellipses E_1 et E_2 .

C - PROPRIETES CARACTERISANT LES CONFIGURATIONS D'UN COUPLE D'ELLIPSES

Ces propriétés, que nous allons établir dans les paragraphes D et E suivants, sont réunies dans la Table I, où figurent :

- la nature de la configuration des ellipses E_1 et E_2 , dans la **première** colonne ;
- dans la seconde colonne, les propriétés des racines λ_1 , λ_2 et λ_3 du polynôme caractéristique $P(\lambda)$, dans cette configuration ;

- les signes correspondants des quantités Ψ , f_1 et f_2 , définies par les égalités (I, 1), dans la dernière colonne.

Dans une même colonne, les propriétés de $P(\lambda)$ - ou celles de Ψ , f_1 et f_2 - figurant dans des lignes différentes sont incompatibles. Ces propriétés caractérisent donc les configurations des ellipses E_1 et E_2 .

Nature de la configuration	Propriétés des racines de $P(\lambda)$	Signes de Ψ , f_1 et f_2
Les ellipses sont tangentes en un point réel	$P(\lambda)$ admet une racine multiple (non nulle)	$\Psi = 0$
Les ellipses n'ont aucun point réel commun	$P(\lambda)$ a trois racines réelles distinctes (non nulles) dont une seule est négative	$\Psi > 0$; f_1 ou $f_2 < 0$ (ou f_1 et $f_2 < 0$)
Les ellipses se coupent en quatre points réels distincts	$P(\lambda)$ possède trois racines négatives distinctes	$\Psi > 0$; f_1 et $f_2 > 0$
Les ellipses ont seulement deux points réels communs distincts	$P(\lambda)$ admet deux racines imaginaires (conjuguées)	$\Psi < 0$

Table I - Propriétés caractérisant les configurations d'un couple d'ellipses.

De la Table I, nous déduisons particulièrement les lemmes n^{os} 1 et 2, énoncés au paragraphe A. Nous allons maintenant démontrer l'équivalence des propriétés contenues dans les deuxième et troisième colonnes de cette table.

D - EQUIVALENCE DES DEUX TYPES DE PROPRIETES CARACTERISTIQUES

Pour démontrer cette équivalence, il suffit de prouver les trois lemmes suivants :

Lemme 3 -

Pour que le polynôme $P(\lambda)$ admette une racine multiple, il est nécessaire et suffisant que la fonction de contact Ψ soit nulle.

Lemme 4 -

Pour que les racines du polynôme $P(\lambda)$ soient réelles et distinctes, il faut et il suffit que la fonction de contact Ψ soit positive.

Lemme 5 -

Dans le cas où toutes les racines du polynôme $P(\lambda)$ sont réelles, elles sont négatives si et seulement si les quantités f_1 et f_2 sont positives (ou nulles).

Considérons donc le polynôme caractéristique défini par l'égalité (I, 9). Sa dérivée :

$$P'(\lambda) = 3\lambda^2 + 2f_1\lambda + f_2 \quad (\text{I, 10})$$

a deux racines μ_1 et μ_2 .

$P(\lambda)$ a une racine multiple si et seulement si le produit $P(\mu_1)P(\mu_2)$ est nul. Pour calculer ce produit en fonction des coefficients f_1 et f_2 de $P(\lambda)$, nous divisons $P(\lambda)$ par sa dérivée :

$$9P(\lambda) = (3\lambda + f_1)P'(\lambda) + Q(\lambda) \quad (\text{I, 11 a}),$$

avec :

$$Q(\lambda) = 2(3f_2 - f_1^2)\lambda + 9 - f_1f_2 \quad (\text{I, 11 b}).$$

Nous définissons la fonction de contact $\Psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b)$ par la relation :

$$\Psi = -81P(\mu_1)P(\mu_2) = -Q(\mu_1)Q(\mu_2) \quad (\text{I, 12}).$$

En calculant la somme et le produit des racines μ_1 et μ_2 du trinôme $P'(\lambda)$ en fonction de f_1 et f_2 , nous obtenons aisément l'expression (I, 1 a) de Ψ .

Grâce à la forme (I, 12) de la fonction de contact, le Lemme 3 est ainsi démontré. Si les trois racines de $P(\lambda)$ sont réelles et distinctes, les racines μ_1 et μ_2 de $P'(\lambda)$ le sont aussi (nous prenons $\mu_1 < \mu_2$). $P(\lambda)$ atteint un maximum positif pour $\lambda = \mu_1$ et un minimum négatif au point $\lambda = \mu_2$. Ψ est donc positive d'après l'égalité (I, 12).

Réciproquement, si Ψ est positive, les racines μ_1 et μ_2 de $P'(\lambda)$ ne sont pas imaginaires, sinon les nombres $P(\mu_1)$ et $P(\mu_2)$ seraient imaginaires conjugués (ou réels et confondus), et leur produit ne pourrait pas être négatif, comme l'impose la relation (I, 12). De même les racines μ_1 et μ_2 sont distinctes. Comme le produit du maximum et du minimum (relatifs) de $P(\lambda)$ est négatif, les racines de ce polynôme sont réelles et distinctes. La preuve du Lemme 4 est ainsi terminée.

Démontrons maintenant le Lemme 5. Suivant l'égalité (I, 9),
 $-f_1$ est la somme des racines de $P(\lambda)$ et f_2 est la somme de leurs produits deux à deux. Si les racines de $P(\lambda)$ sont réelles et négatives, f_1 et f_2 sont positifs. Inversement, si f_1 et f_2 sont positifs, $P(\lambda)$ est positif quand λ est positif ou nul et ne peut donc admettre aucune racine positive ou nulle.

E - ETUDE DES RACINES DU POLYNÔME CARACTERISTIQUE

Après avoir démontré l'équivalence des propriétés rassemblées dans les deux dernières colonnes de la Table I, nous devons prouver les propriétés des racines de $P(\lambda)$ réunies dans la seconde colonne, et correspondant aux configurations des ellipses décrites dans la première colonne. Examinons ces configurations à tour de rôle.

1 - Les ellipses sont tangentes en un point réel

Nous allons démontrer la proposition bien connue suivante :

Lemme 6 -

Pour que les ellipses égales E_1 et E_2 soient tangentes en un point réel, il faut et il suffit que leur polynôme caractéristique $P(\lambda)$ ait une racine multiple.

Quand E_1 et E_2 sont tangentes, deux au moins de leurs points d'intersection, M_1 et M_2 par exemple, sont confondus avec le point de contact. Dans ce cas les coniques dégénérées C_2 et C_3 définies au début du paragraphe B - c'est-à-dire les couples de droites $(M_1 M_3, M_2 M_4)$ et $(M_1 M_4, M_2 M_3)$ - sont identiques. Les racines λ_2 et λ_3 du polynôme $P(\lambda)$ sont confondues.

Réciproquement, si $\lambda_2 = \lambda_3$, les coniques dégénérées C_2 et C_3 sont identiques. Les droites $M_1 M_3$ et $M_2 M_3$ (ou $M_1 M_3$ et $M_1 M_4$) sont confondues. Les points M_1, M_2 et M_3 (ou M_1, M_3 et M_4) sont donc alignés. Deux au moins de ces points, M_1 et M_2 par exemple, sont les mêmes, car aucune ellipse E_1 ou E_2 ne peut couper une droite en plus de deux points. E_1 et E_2 sont alors tangentes en M_1 .

Pour finir la preuve du Lemme 6, nous devons montrer que le point de contact M_1 est nécessairement réel. Si M_1 est imaginaire, les ellipses E_1 et E_2 sont aussi tangentes au point imaginaire conjugué $\overline{M}_1$.

Les tangentes aux points de contact sont imaginaires conjuguées et se coupent donc en un point réel Ω , qui est le pôle [7] de la droite réelle $M_1 \bar{M}_1$ par rapport à chaque conique du faisceau. Comme cette droite ne coupe les ellipses E_1 et E_2 en aucun point réel, le pôle Ω se trouve à l'intérieur des deux ellipses.

Ces ellipses, étant égales, se coupent donc forcément en un point réel M_5 . C'est impossible, sauf si E_1 et E_2 sont confondues, sinon les ellipses auraient au moins cinq points communs.

2 - Les ellipses n'ont aucun point réel commun

Démontrons d'abord que les trois racines du polynôme caractéristique sont réelles ; (ces racines sont distinctes d'après le Lemme 6). Désignons par M_1 , $\bar{M}_1$, M_2 et $\bar{M}_2$ les points (imaginaires) communs aux ellipses, $\bar{M}_\alpha$ ($\alpha = 1$ ou 2) étant le point imaginaire conjugué de M_α .

Les coniques dégénérées du faisceau défini au paragraphe I - B sont les couples de droites $(M_1 \bar{M}_1, M_2 \bar{M}_2)$, $(M_1 \bar{M}_2, \bar{M}_1 M_2)$ et $(M_1 M_2, \bar{M}_1 \bar{M}_2)$. La première conique dégénérée est réelle ; les deux autres coniques sont chacune formées de deux droites imaginaires conjuguées, qui se coupent en un point réel.

Chaque conique dégénérée C_i ($i = 1, 2$ ou 3), associée à la racine λ_i du polynôme caractéristique, contient donc au moins un point réel N_i . Suivant l'égalité (I, 2) :

$$F_1(N_i) + \lambda_i F_2(N_i) = 0.$$

Comme les quantités $F_1(N_i)$ et $F_2(N_i)$ ne sont pas toutes nulles, (les ellipses E_1 et E_2 ne se rencontrent pas), λ_i est bien réel.

En nous servant du Lemme 5 (paragraphe I - D), nous allons maintenant démontrer que les racines du polynôme caractéristique $P(\lambda)$ ne sont pas toutes négatives. Faisons croître la distance r des centres O_1 et O_2 des ellipses, en laissant fixes la direction de leurs axes et celle de la droite $O_1 O_2$, de manière que les ellipses restent extérieures l'une à l'autre. Quand $r \rightarrow +\infty$, les fonctions f_1 et f_2 deviennent négatives, d'après l'égalité (I, 1 b). Suivant le Lemme 5, les racines de $P(\lambda)$ ne sont alors pas toutes négatives aux grandes valeurs de r .

Or, les racines λ_1 , λ_2 et λ_3 du polynôme $P(\lambda)$, défini par la relation (I, 9), sont des fonctions continues de ses coefficients f_1 et f_2 , donc de r . Comme $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = -1$, aucune racine n'a pu changer de signe pendant l'accroissement de r .

3 - Les ellipses se coupent en quatre points réels distincts

Montrons que les racines de $P(\lambda)$ sont réelles et négatives ; (elles sont distinctes d'après le Lemme 6). Les coniques dégénérées C_i ($i = 1, 2$ ou 3) du faisceau sont des couples de droites réelles. Sur C_i , nous pouvons donc trouver un point N_i extérieur aux deux ellipses E_1 et E_2 . Suivant la relation (I, 2), $F_1(N_i) + \lambda_i F_2(N_i)$ est nul, tandis que les quantités $F_1(N_i)$ et $F_2(N_i)$ sont positives, selon l'égalité (I, 6 a). λ_i est donc négatif.

4 - Les ellipses ont seulement deux points réels communs distincts

Nous allons prouver que le polynôme $P(\lambda)$ n'a pas toutes ses racines réelles.

Soient M_1 et M_2 les points d'intersection réels ; les autres points communs à E_1 et E_2 , M_3 et $\bar{M}_3$, sont imaginaires conjugués. La racine λ_2 de $P(\lambda)$, associée au couple C_2 de droites $(M_1 M_3, M_2 \bar{M}_3)$, n'est pas réelle, sinon ces droites seraient imaginaires conjuguées, d'après l'équation (I, 2) de la conique dégénérée C_2 ($\lambda = \lambda_2$) ; (nous vérifions que ces droites ne sont pas réelles). Le point réel M_1 de la droite $M_1 M_3$ appartiendrait donc à la droite $M_2 \bar{M}_3$, qui couperait chaque ellipse E_1 ou E_2 en trois points distincts, ce qui est impossible.

F - COMPARAISON DE LA FONCTION DE CONTACT DES ELLIPSES A CELLE DE LEURS GRANDS CERCLES

Pour des cercles de rayon a , dont la distance des centres est r , la fonction de contact Ψ prend la forme simple $\Psi_d(\frac{r}{a})$ suivante, d'après les égalités (I, 1) :

$$\Psi_d\left(\frac{r}{a}\right) = 3 \left(\frac{r}{a}\right)^6 \left(\frac{r^2}{a^2} - 4\right) \quad (\text{I, 13}).$$

Quand la distance r des centres O_1 et O_2 des ellipses E_1 et E_2 , définies au paragraphe I-A, est supérieure à $2a$, elles ne se rencontrent

pas. Donc, lorsque la fonction de contact $\psi_d(\frac{r}{a})$ de leurs grands cercles est positive, celle des ellipses l'est aussi, suivant le Lemme 2 (paragraphe I - A).

Dans l'Appendice 1, nous démontrons la relation :

$$\psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b) \geq \psi_d(\frac{r}{a}), \text{ pour } r \geq 2a > 2b \quad (I, 14),$$

l'égalité ayant lieu si et seulement si les grands axes des ellipses sont parallèles à la ligne des centres $O_1 O_2$. Cette inégalité nous sera indispensable dans le calcul de la pression.

G - FONCTION DE CONTACT DE DEUX ELLIPSOÏDES DE RÉVOLUTION ÉGAUX

Considérons maintenant deux ellipsoïdes de révolution égaux E_1 et E_2 . Soient respectivement O_1 et O_2 leurs centres, $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ les vecteurs unitaires de leurs axes de révolution. La longueur de chaque ellipsoïde suivant l'axe de révolution est $2a$, leur plus grande dimension transversale égale $2b$. Nous posons : $\vec{r} = O_1 \vec{O}_2$.

Dans l'Appendice 2, nous démontrons la proposition suivante :

Lemme 7 -

Pour que les ellipsoïdes E_1 et E_2 ne se rencontrent pas ou soient tangents extérieurement, il faut et il suffit que les trois fonctions ϕ , S_1 et S_2 suivantes soient positives ou nulles, l'une au moins des quantités g_1 , g , et h étant négative.

g_α ($\alpha = 1$ ou 2) et h sont les fonctions suivantes de $\vec{r}$, $\vec{u}_1$, $\vec{u}_2$, a et b -
 $(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{r})$ est un produit mixte - :

$$g_\alpha = 4 + \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a}\right)^2 (\vec{u}_1 \wedge \vec{u}_2)^2 - \frac{r^2}{b^2} + \left(\frac{1}{b^2} - \frac{1}{a^2}\right) (\vec{r} \cdot \vec{u}_\alpha)^2 \quad (\text{I, 15 a})$$

$$h = g_1 + g_2 - 2 - \frac{1}{b^2} \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a}\right)^2 (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{r})^2 \quad (\text{I, 15 b}).$$

Si nous posons :

$$p = -h \quad (\text{I, 16 a})$$

$$q = g_1 g_2 - 4 \quad (\text{I, 16 b})$$

$$w = 4h - g_1^2 - g_2^2 \quad (\text{I, 16 c}),$$

ϕ , S_1 et S_2 sont les fonctions suivantes de $\vec{r}$, $\vec{u}_1$, $\vec{u}_2$, a et b :

$$\phi = 4(p^2 - 3q)(q^2 - 3wp) - (9w - pq)^2 \quad (\text{I, 17 a})$$

$$S_1 = h^2 - 2g_1 g_2 - 4 \quad (\text{I, 17 b})$$

$$S_2 = g_1^2 g_2^2 + 8g_1 g_2 - 2h(g_1^2 + g_2^2) \quad (\text{I, 17 c}).$$

$\phi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2 ; a, b)$ joue bien le rôle de la fonction de contact des ellipsoïdes, comme le montre le lemme suivant :

Lemme 8 -

Quand les ellipsoïdes E_1 et E_2 sont tangents, la fonction ϕ est nulle.

Mais la fonction de contact Φ peut être nulle bien que les ellipsoïdes ne soient tangents en aucun point réel ; (cependant ils sont alors tangents en deux points imaginaires conjugués) ; en effet, dans l'Appendice 2, nous démontrons la proposition suivante :

Lemme 9 -

Quand les ellipsoïdes E_1 et E_2 n'ont aucun point commun, pour que la fonction de contact Φ soit nulle, il faut et il suffit que les axes de révolution et la ligne des centres $O_1 O_2$ soient coplanaires et que les quantités $|\vec{r} \cdot \vec{u}_1|$ et $|\vec{r} \cdot \vec{u}_2|$ soient égales.

Cette condition est d'ailleurs suffisante, même si les ellipsoïdes se coupent, comme nous pouvons le vérifier directement à l'aide des relations (I, 15) , (I, 16) et (I, 17 a). En particulier Φ est nulle quand les axes de révolution des ellipsoïdes sont parallèles. La fonction Φ est identiquement nulle pour des sphères ($a = b$).

Comme nous le verrons au paragraphe III - C, ces particularités de la fonction de contact des ellipsoïdes, résumées dans le Lemme 9, vont nous empêcher de calculer la pression d'un système d'ellipsoïdes durs, faute d'une inégalité analogue à la relation (I, 14).

II - PROPRIETES DU SYSTEME A TRES HAUTE DENSITE

A - LES ETATS D'EMPILEMENT MAXIMUM

Considérons un système comprenant N ellipses dures de demi-grand axe a et de demi-petit axe b . Ces ellipses sont enfermées dans une boîte ayant la forme d'un parallélogramme ; nous utilisons les conditions aux limites périodiques. A la densité maximum, tous les grands axes des ellipses ont sans doute la même direction Ox .

Dans un état d'empilement maximum, appliquons aux ellipses l'affinité suivante, définie dans le système d'axes rectangulaires Oxy :

$$x' = x/a \quad (II, 1 a)$$

$$y' = y/b \quad (II, 1 b).$$

Nous obtenons un système de N disques durs de rayon unité, qui vérifient aussi dans leur boîte les conditions aux limites périodiques et se trouvent également dans leur état de densité maximum.

Réciproquement, partons de cette configuration des N disques durs (Figure 1) et faisons l'affinité inverse de la transformation (II,1); nous construisons un état d'empilement maximum des N ellipses. Si nous faisons tourner l'axe Ox avant d'appliquer l'affinité précédente aux

disques, nous engendrerons par cette transformation une infinité continue d'états d'empilement maximum (Figure 2), ne se déduisant pas les uns des autres par déplacement. Tous ces états ont la même densité maximum ρ_0 , donnée par la relation suivante :

$$\rho_0 \text{ ab} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \quad (\text{II}, 2) .$$

Dans le cas des ellipses, chaque configuration de densité maximum est donc caractérisée par l'angle $\phi_0 = \left(\text{Ox}, \text{OO}_1^{(0)} \right)$ défini modulo π dans la Figure 1. Dans le calcul de Monte-Carlo, nous placerons toujours les N ellipses dans une boîte rectangulaire, presque carrée, compatible (à la densité maximum) avec le réseau de la Figure 2, pour lequel $\phi_0 = 0$ ou $\pi/2$, selon les valeurs de a/b . Ce réseau d'ellipses, dont les grands axes sont parallèles à Ox , est donc caractérisé ici par l'un des jeux de paramètres suivants :

$$\phi_0 = 0 ; \phi = \frac{\pi}{2}, \text{OO}_1^{(0)} = 2a, \text{O}_2^{(0)} \text{O}_3^{(0)} = 2\sqrt{3}b \quad (\text{II}, 3 \text{ a})$$

$$\phi_0 = \frac{\pi}{2} ; \phi = \frac{\pi}{2}, \text{OO}_1^{(0)} = 2b, \text{O}_2^{(0)} \text{O}_3^{(0)} = 2\sqrt{3}a \quad (\text{II}, 3 \text{ b}) .$$

Dans le cas où $\phi_0 = 0$, ce réseau comprend N_y lignes parallèles à $\text{OO}_1^{(0)}$ (ou Ox) et équidistantes, qui contiennent chacune N_x centres d'ellipses plus proches voisines ; (le nombre N_y est alors pair si l'on utilise les conditions aux limites périodiques). De même, quand $\phi_0 = \pi/2$, les sites du réseau occupent N_x colonnes parallèles à $\text{OO}_1^{(0)}$ (ou Oy) et équidistantes, à raison de N_y centres d'ellipses adjacentes par colonne ;

(dans ce dernier cas, les conditions aux limites périodiques imposent au nombre N_x d'être pair).

Maintenant notre but principal est de déterminer le comportement asymptotique de la pression P , quand l'aire A de la boîte tend vers sa valeur minimum $A_0 = N/\rho_0$. Dans ces conditions, P se comporte sans doute de la manière suivante :

$$\frac{P A}{N k T} = \frac{\nu}{\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)} (1 + \epsilon_1) \quad (\text{II, 4}) ,$$

ϵ_1 tendant vers zéro quand $A \rightarrow A_0$; ν est une constante dépendant de a/b , de N et de la forme de la boîte, compatible avec l'un des réseaux solides représentés dans la Figure 2. (k et T sont respectivement la constante de Boltzmann et la température absolue, qui ne joue aucun rôle dans le facteur de compressibilité).

La fonction de partition Z_N du système a donc le comportement suivant :

$$\text{Log } Z_N = N \nu \text{Log} \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right) \cdot [1 + \epsilon_2] \quad (\text{II, 5}) ,$$

ϵ_2 tendant aussi vers zéro quand $A \rightarrow A_0$.

Dans le cas de N disques durs [9] , $\nu = 2 - \frac{2}{N}$; en effet chaque disque possède deux degrés de liberté de translation, le terme $-\frac{2}{N}$ est dû à l'invariance du système dans toute translation d'ensemble.

La théorie du volume libre, dans laquelle nous fixons les six ellipses adjacentes d'une ellipse donnée, fournit la valeur $\nu = 3$. Cette théorie prévoit la valeur $\nu = 2$ dans le cas des disques. La différence est due au degré de liberté de rotation de chaque ellipse.

Nous remarquons que la valeur de ν prédite par la théorie du volume libre est indépendante du rapport a/b , de la forme du réseau solide représenté dans la Figure 2, (et du nombre N d'ellipses). Comme nous le verrons au paragraphe C, il faut sans doute retrancher de la valeur $\nu = 3$ une quantité $\Delta\nu$ qui est de l'ordre de $1/\sqrt{N}$ (et non de $2/N$), pour les grandes valeurs de N . $\Delta\nu$ dépend très vraisemblablement de a/b et de la forme de la boîte. En tout cas l'intervalle de validité des expressions asymptotiques (II,4) et II,5), en ce qui concerne A/A_0 , dépend fortement du rapport a/b , comme nous le montrerons au paragraphe B-2.

B - APPLICATION DE LA THEORIE DU VOLUME LIBRE

Dans un état d'empilement maximum (Figure 2), considérons l'ellipse E initialement centrée en l'origine O , et entourée de ses six ellipses adjacentes E_j de centres $O_j^{(0)}$ ($1 \leq j \leq 6$). Tous les grands axes des ellipses sont alors parallèles à Ox .

A la densité A_0/A , le jème site du réseau solide vient occuper la position O_j définie par le vecteur suivant :

$$\vec{R}_j = \vec{OO}_j = \left(\frac{A}{A_0} \right)^{\frac{1}{2}} \vec{R}_j^{(0)} \quad (\text{II, 6 a}) ,$$

avec :

$$\vec{R}_j^{(0)} = \vec{OO}_j^{(0)} \quad (\text{II, 6 b}) .$$

Fixons chaque ellipse E_j , son centre coïncidant avec O_j et son grand axe restant parallèle à Ox . L'ellipse E se déplace ainsi entre ses plus proches voisines. Dans le système d'axes rectangulaires Oxy , nous désignons par x et y les coordonnées du centre de l'ellipse E et par θ l'angle de son grand axe avec Ox ($|\theta| \leq \frac{\pi}{2}$). Dans l'espace de configuration, la fonction de partition associée à l'ellipse E s'écrit donc :

$$Z_1 = \int dx dy d\theta \quad (\text{II, 7 a}).$$

A la densité A_0/A , la théorie du volume libre consiste à remplacer la fonction de partition Z_N du système d'ellipses, contenu dans une boîte compatible avec le réseau précédent, par $(Z_1)^N$:

$$Z_N \approx (Z_1)^N \quad (\text{II, 7 b}).$$

1 - Expression asymptotique approchée de la pression.

Nous allons démontrer ici que la théorie du volume libre prédit la valeur $\nu = 3$ dans les expressions asymptotiques (II, 4) et II, 5), quels que soient le rapport a/b et la forme du réseau solide. D'après la relation (II, 7 b), il suffit donc de prouver que la quantité $\text{Log } Z_1$ est un infiniment grand équivalent à $3 \text{Log} \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right)$, quand $A \rightarrow A_0$; autrement dit, toutes les grandeurs x , y et θ figurant dans l'expression (II, 7 a) sont des infiniment petits du même ordre que $\frac{A}{A_0} - 1$.

Nous désignons par $\vec{r}$ le vecteur position du centre de l'ellipse E (relativement à 0), par $\vec{u}$ le vecteur unitaire de son grand axe et par $\vec{u}_0$ celui de Ox. Le vecteur unitaire $\vec{u}_j$ du grand axe de chaque ellipse E_j coïncide avec $\vec{u}_0$. Dans le système d'axes Oxy, les coordonnées $X_j^{(0)}$ et $Y_j^{(0)}$ du site $O_j^{(0)}$ sont reliées aux coordonnées $X'_j^{(0)}$ et $Y'_j^{(0)}$ du site correspondant $O'^{(0)}_j$, placé sur le réseau des disques de rayon unité (Figure 1), par les égalités (II, 1), qui s'écrivent ici :

$$X_j^{(0)} = a X'_j^{(0)} \quad (\text{II, 8 a})$$

$$Y_j^{(0)} = b Y'_j^{(0)} \quad (\text{II, 8 b}).$$

Nous posons en outre :

$$\vec{R}_j^{(0)} = \vec{OO}'_j^{(0)} \quad (\text{II, 8 c}).$$

Faisons le changement de coordonnées suivant :

$$x = \sigma a \xi \quad (\text{II, 9 a})$$

$$y = \sigma b \eta \quad (\text{II, 9 b})$$

$$\theta = \sigma \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a} \right)^{-1} \tau \quad (\text{II, 9 c}),$$

avec :

$$\sigma = \left[\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a} \right)^2 \theta^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II, 9 d}),$$

de sorte que le point $D = (\xi, \eta, \tau)$ appartienne à la sphère unité Σ_3 de l'espace à trois dimensions, sur laquelle l'élément d'aire est $d\Omega_3(D)$. La "direction" et l'amplitude du déplacement subi par l'ellipse E sont respectivement caractérisées par le point D et le nombre σ .

Selon l'égalité (II, 7 a), la fonction de partition Z_1 de l'ellipse E a donc la forme suivante :

$$Z_1 = \frac{a^2 b^2}{a^2 - b^2} \int \sigma^2 d\sigma d\Omega_3(D) \quad (\text{II, 10}).$$

σ tend uniformément vers zéro quand $A \rightarrow A_0$. Nous allons maintenant vérifier que σ est bien un infiniment petit du même ordre que $\frac{A}{A_0} - 1$.

Dans cette limite, cherchons donc si l'ellipse E , définie par le point D et l'amplitude σ , ne rencontre aucune ellipse E_j ; utilisons le Lemme 2, énoncé au paragraphe I-A, et les fonctions définies par les relations (I, 1).

Quand $A \rightarrow A_0$, chaque quantité $f_{\alpha j} = f_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}_j, \vec{u}, \vec{u}_j)$, (ici $\alpha = 1$ ou 2), tend uniformément vers $f_{\alpha}(\vec{R}_j^{(0)}, \vec{u}_0, \vec{u}_0)$, qui vaut -1 d'après l'égalité (A3, 2b). Donc, dans cette limite, pour que l'ellipse E ne rencontre pas E_j , il faut et il suffit que la fonction Ψ_j suivante soit positive :

$$\Psi_j(\sigma, D, \frac{A}{A_0}) = \Psi(\vec{r} - \vec{R}_j, \vec{u}, \vec{u}_j) \quad (\text{II, 11}).$$

Quel que soit le point D de la sphère unité Σ_3 , quand $\sigma \rightarrow 0$, ψ_j tend vers la fonction $\psi_L(\frac{A}{A_0})$ définie par l'égalité (A3, 3). Posons donc :

$$3^{-1} \cdot 2^{-7} \psi_j = 2 \left(\frac{A}{A_0}\right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right) - \sigma \ell_j \left(\sigma, D, \frac{A}{A_0}\right) \quad (\text{II}, 12).$$

La fonction $\ell_j(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ est partout continue et indéfiniment dérivable, même lorsque σ est nul. Quand $A \rightarrow A_0$ et $\sigma \rightarrow 0$, ℓ_j tend vers la fonction $L_j(D)$ suivante :

$$L_j(D) = -3^{-1} \cdot 2^{-7} \left(\frac{\partial}{\partial \sigma} \psi_j \right)_{0, D, 1} \quad (\text{II}, 13).$$

Pour déterminer cette dérivée partielle, nous utilisons l'égalité (II, 11), l'identité : $\vec{u}_j = \vec{u}_0$, les relations (II, 9), (II, 6), (I, 1), (A3, 2b) et (II, 8). Désignons en outre par $\vec{\zeta}$ le vecteur de composantes ξ et η dans le repère Oxy et par c_j la constante suivante ($1 \leq j \leq 6$) :

$$c_j = \frac{1}{2} \frac{X'_j(0)}{j} \cdot \frac{Y'_j(0)}{j} \quad (\text{II}, 14).$$

$L_j(D)$ est la forme linéaire de ξ , η et τ suivante :

$$L_j(D) = \vec{\zeta} \cdot \frac{\vec{R}'_j(0)}{j} + c_j \tau \quad (\text{II}, 15).$$

Dans la limite où A tend vers A_0 , nous voulons déterminer le comportement asymptotique de la fonction de partition Z_1 , définie par l'égalité (II, 10).

Cherchons d'abord une borne inférieure de Z_1 , proportionnelle à $(\frac{A}{A_0} - 1)^3$. Quand D parcourt la sphère unité Σ_3 et lorsque $\frac{A}{A_0}$ et σ restent inférieurs à 2, les six fonctions continues $\ell_j(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ admettent une borne supérieure M_1 (positive). Selon l'identité (II, 12), toutes les quantités Ψ_j sont positives pour $\sigma < \frac{2}{M_1} (\frac{A}{A_0} - 1)$. La relation (II, 10) nous donne alors l'inégalité suivante :

$$Z_1 \geq K_1 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^3 \quad (\text{II, 16 a}),$$

avec :

$$K_1 = \frac{2^5 \pi a^2 b^2}{3 M_1^3 (a^2 - b^2)} \quad (\text{II, 16 b}).$$

Cherchons de la même manière une borne supérieure de Z_1 , proportionnelle à $(\frac{A}{A_0} - 1)^3$. Désignons par $\ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ le plus grand des six nombres $\ell_j(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ et par $L(D)$ la valeur maximum des six quantités $L_j(D)$:

$$L(D) = \max_j [L_j(D)] \quad (\text{II, 17}).$$

D'après les identités (II, 12), les six inégalités $\Psi_j > 0$ sont équivalentes à la relation suivante :

$$2 \left(\frac{A}{A_0}\right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right) - \sigma \ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0}) > 0 \quad (\text{II, 18}).$$

Quand $A \rightarrow A_0$, σ tend vers zéro uniformément et $\ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0}) \rightarrow L(D)$ uniformément. A la fin de ce paragraphe, nous allons prouver que le minimum de $L(D)$ est positif. Donc, quand l'aire $\frac{A}{A_0}$ est suffisamment voisine

de 1, la fonction $\ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ possède une borne inférieure positive m_1 , indépendante de $\frac{A}{A_0}$.

Dans ces conditions, nous pouvons supposer que $\frac{A}{A_0}$ est inférieur à 2 ; en utilisant les relations (II, 18) et (II, 10), nous obtenons l'inégalité suivante :

$$Z_1 \leq K_2 \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right)^3 \quad (\text{II, 19 a}),$$

avec :

$$K_2 = \frac{2^{14} \pi a^2 b^2}{3 m_1^3 (a^2 - b^2)} \quad (\text{II, 19 b}).$$

En comparant les relations (II, 16 a) et (II, 19 a), nous prouvons facilement que la théorie du volume libre, caractérisée par l'approximation (II, 7 b), donne la valeur $v = 3$ dans les expressions asymptotiques (II, 5) et (II, 4).

Mais nous devons encore démontrer que la fonction $L(D)$, définie par les égalités (II, 17) et (II, 15), est toujours positive quand $\zeta^2 + \tau^2 = 1$.

Nous remarquons d'abord l'identité suivante :

$$\sum_{i=1}^6 L_i(D) = 0 \quad (\text{II, 20}).$$

Pour la prouver, il suffit d'utiliser l'égalité (II, 14) et la symétrie hexagonale de la Figure 1, qui donnent les relations suivantes, (où l'indice j est défini modulo 6) :

$$\vec{R}'_j(0) + \vec{R}'_{j+3}(0) = \vec{0} \quad (\text{II, 21 a})$$

$$c_j = c_{j+3} = \sin \left(2\phi_0 - \frac{4\pi}{3} + j \frac{4\pi}{3} \right) \quad (\text{II, 21 b})$$

$$c_1 + c_2 + c_3 = 0 \quad (\text{II, 21 c}).$$

Selon les égalités (II, 20) et (II, 17), la fonction $L(D)$ est donc positive ou nulle. $L(D) = 0$ si et seulement si toutes les quantités $L_j(D)$ sont nulles. Montrons que ce cas est impossible quand D parcourt la sphère unité Σ_3 , c'est-à-dire que le système des six équations $L_j(D) = 0$, où D n'appartient plus forcément à Σ_3 , admet la seule solution $\xi = \eta = \tau = 0$.

En effet, les relations (II, 15) et (II, 21) entraînent les identités suivantes (pour $1 \leq j \leq 3$) :

$$L_j(D) + L_{j+3}(D) = 2 c_j \tau.$$

Comme les quantités c_j ne sont pas toutes nulles, $\tau = 0$ quand $L(D) = 0$. Dans ce cas $\vec{\xi} \cdot \vec{R}'_j(0)$ est nul, quel que soit j , et $\vec{\xi} = \vec{0}$.

2 - Domaine de validité de la théorie du volume libre.

Quand $N \rightarrow +\infty$, le nombre v figurant dans les expressions asymptotiques (II, 4) et (II, 5) tend vers 3, quels que soient le rapport a/b et la forme de la boîte contenant les N ellipses. Mais l'intervalle de validité de ces expressions asymptotiques, en ce qui concerne A/A_0 , dépend de N , de a/b et de la forme de la boîte.

Nous allons dégager quelques aspects de cette dépendance, notamment dans les limites où $a/b \rightarrow 1$ et où $a/b \rightarrow +\infty$, en étudiant le domaine de densités dans lequel la théorie du volume libre n'est pas justifiée a priori. Nous utiliserons les idées de Salsburg et Wood [9] à propos de la théorie du volume libre appliquée aux disques durs.

Ici nous considérons seulement le cas où le réseau d'ellipses est défini par l'une des conditions (II, 3 a) et (II, 3 b). La boîte, compatible avec ce réseau, est rectangulaire ; à la densité A_0/A , ses côtés, parallèles aux axes Ox et Oy , ont respectivement les longueurs suivantes :

$$L_x = \left(\frac{A}{A_0} \right)^{\frac{1}{2}} L_x^{(0)} \quad (\text{II, 22 a})$$

$$L_y = \left(\frac{A}{A_0} \right)^{\frac{1}{2}} L_y^{(0)} \quad (\text{II, 22 b}) ,$$

avec :

$$\text{pour } \phi_0 = 0 , L_x^{(0)} = 2 a N_x \text{ et } L_y^{(0)} = \sqrt{3} b N_y \quad (\text{II, 22 c}) ,$$

$$\text{pour } \phi_0 = \frac{\pi}{2} , L_x^{(0)} = \sqrt{3} a N_x \text{ et } L_y^{(0)} = 2 b N_y \quad (\text{II, 22 d}) .$$

A chaque densité, nous fixons le centre de la Nème ellipse en 0, afin d'empêcher toute translation globale du système. Pour que la théorie du volume libre soit valable, il faut que nous ne puissions faire tourner complètement aucune ellipse, ni éloigner son centre du site correspondant sur le réseau solide.

A la densité A_0/A , les déplacements maximum possibles d'une ellipse, suivant les axes Ox et Oy , sont au moins égaux à $L_x - L_x^{(0)}$ et $L_y - L_y^{(0)}$. Nous ne pourrons faire glisser aucune rangée d'ellipses, parallèle à Ox ou Oy , seulement si $L_x - L_x^{(0)}$ et $L_y - L_y^{(0)}$ sont respectivement inférieurs à $2a$ et $2b$ (ou du même ordre de grandeur).

D'autre part, pour qu'une ellipse ne puisse pas tourner complètement, il faut que la longueur $L_y - L_y^{(0)}$ disponible suivant l'axe Oy soit inférieure à la différence $2a - 2b$.

Les égalités (II, 22) nous donnent alors les conditions nécessaires suivantes, concernant la validité de la théorie du volume libre :

$$N_x \left(\sqrt{\frac{A}{A_0}} - 1 \right) \lesssim 1 \quad (\text{II, 23 a})$$

$$N_y \left(\sqrt{\frac{A}{A_0}} - 1 \right) \lesssim \min \left(1, \frac{a}{b} - 1 \right) \quad (\text{II, 23 b}) .$$

Fixons d'abord les nombres N_x et N_y , ($N = N_x N_y$ est alors constant). A densité donnée, quand $a/b \rightarrow 1$, l'inégalité (II, 23 b) cesse d'être satisfaite, car les ellipses se mettent à tourner complètement. La pression du système tend vers celle des disques durs, pour laquelle $\nu = 2$. (Nous remarquons que la forme de la boîte ne varie pratiquement plus quand $a/b \rightarrow 1$).

Faisons tendre au contraire a/b vers l'infini en maintenant la forme de la boîte, c'est-à-dire le rapport $L_x^{(0)}/L_y^{(0)}$, à peu près fixe. Dans ce cas N_y/N_x augmente infiniment aussi vite que a/b et l'inégalité

(II, 23 b) cesse encore d'être vérifiée. Des lignes d'ellipses se mettent alors à glisser parallèlement à l'axe Ox .

Donc, pour une forme de boîte pratiquement invariable, la longueur de l'intervalle d'aires A/A_0 , où l'expression asymptotique (II,4) est valable, tend vers zéro quand $a/b \rightarrow 1$ (N étant fixé) ou lorsque $a/b \rightarrow +\infty$ ($N_y \rightarrow +\infty$).

C - DEPLACEMENTS ANORMALEMENT GRANDS A DENSITE TRES ELEVÉE

Nous utilisons toujours les conditions aux limites périodiques. Pour empêcher toute translation globale du système, nous fixons le centre de la N^{ème} ellipse en l'origine O , qui sera donc un site du réseau solide. Cette contrainte ne modifie pas la valeur de v , dans les expressions asymptotiques (II, 5) et (II, 4).

Dans l'état d'empilement maximum, les grands axes des N ellipses sont parallèles à Ox et leurs centres occupent les noeuds du réseau solide (représenté dans la Figure 2), que nous supposons unique, compte tenu des conditions aux limites. Cependant, dans quelques cas particuliers, plusieurs réseaux, définis respectivement par les conditions (II,3 a) et (II,3 b) par exemple, sont compatibles avec la forme de la boîte contenant les ellipses. Si ces réseaux sont complètement disconnectés à très haute densité, nous pouvons considérer chacun d'eux isolément.

Quand $A \rightarrow A_0$, nous sommes tentés de penser que les $2N - 2$ composantes des déplacements des $N - 1$ centres mobiles, à partir des sites

correspondants du réseau solide, et les N angles, formés par les grands axes des ellipses avec Ox , sont des infiniment petits du même ordre que la variation des dimensions de la boîte, c'est-à-dire que $(\frac{A}{A_0} - 1)$. Dans ce cas le nombre ν intervenant dans les expressions asymptotiques (II, 5) et (II, 4) serait égal à $3 - \frac{2}{N}$.

Cependant, dans le cas du réseau solide défini par les conditions (II, 3 a) et (II, 22 c), nous allons montrer l'existence de $2 N_x - 1$ "directions" indépendantes, le long desquelles tous les déplacements sont des infiniment petits d'ordre au plus égal à celui de $\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^{\frac{1}{2}}$. A très haute densité, ces déplacements anormalement grands vont augmenter la fonction de partition Z_N , donc réduire la pression. Nous allons prouver que ν est compris entre $3 - \frac{1}{N} - \frac{2 N_x}{N}$ et $3 - \frac{2}{N}$.

Tandis que l'invariance par translation diminue seulement la constante $\nu = 3$, donnée par la théorie du volume libre, de la valeur $2/N$, ces $2 N_x - 1$ modes collectifs statiques abaissent certainement ν d'une quantité $\Delta \nu$, qui est de l'ordre de $1/\sqrt{N}$ aux grandes valeurs de N , pour une forme de boîte et un rapport a/b fixés.

Nous utilisons les idées de Salsburg et Wood [9] au sujet des disques durs à densité très élevée. A l'aire A/A_0 , nous définissons les positions O_j des N sites du réseau solide à l'aide des relations (II, 6) et (II, 8), (mais maintenant l'indice j varie de 1 à N). Posons :

$$\vec{R}_{jk}(0) = \vec{R}_k(0) - \vec{R}_j(0) \quad (\text{II, 24 a})$$

$$\vec{R}'_{jk}(0) = \vec{R}'_k(0) - \vec{R}'_j(0) \quad (\text{II, 24 b})$$

$$X'_{jk}(0) = X'_k(0) - X'_j(0) \quad (\text{II, 24 c})$$

$$Y'_{jk}(0) = Y'_k(0) - Y'_j(0) \quad (\text{II, 24 d}).$$

Nous désignons par $\vec{r}_j$ le vecteur position du centre de la $j^{\text{ème}}$ ellipse E_j (relativement à 0) et par θ_j l'angle (modulo Π) de son grand axe avec Ox ; si $\vec{u}_j$ est le vecteur unitaire de ce grand axe :

$$\theta_j = (\text{Ox}, \vec{u}_j) = (\vec{u}_0, \vec{u}_j) \quad , \quad \text{avec } |\theta_j| \leq \frac{\Pi}{2} \quad (\text{II, 25 a}).$$

Nous posons aussi :

$$\Delta \vec{r}_j = \vec{r}_j - \vec{R}_j \quad (\text{II, 25 b}).$$

Le centre de l'ellipse E_N coïncide toujours avec 0 :

$$\vec{r}_N = \vec{R}_N = \vec{R}_N(0) = \vec{R}'_N(0) = \Delta \vec{r}_N = \vec{0} \quad (\text{II, 25 c}).$$

Dans chaque configuration du système, nous numérotions les $N - 1$ autres ellipses de façon que la quantité

$$\sum_{k=1}^{N-1} (\Delta \vec{r}_k)^2 \quad \text{soit minimum. Nous désignons par } \Delta x_j \text{ et } \Delta y_j$$

les composantes du vecteur $\Delta \vec{r}_j$ dans le repère Oxy ($\Delta x_N = \Delta y_N = 0$).

Faisons le changement de coordonnées suivant, semblable à la transformation (II, 9) :

$$\Delta x_j = \sigma a \xi_j \quad (\text{II, 26 a})$$

$$\Delta y_j = \sigma b \eta_j \quad (\text{II, 26 b})$$

$$\theta_j = \sigma \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a} \right)^{-1} \tau_j \quad (\text{II, 26 c}) ,$$

avec :

$$\sigma = \left[\sum_{k=1}^N \frac{\Delta x_k^2}{a^2} + \frac{\Delta y_k^2}{b^2} + \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a} \right)^2 \theta_k^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II, 26 d}).$$

Soit $\vec{\zeta}_j$ le vecteur dont les composantes sont ξ_j et η_j dans le repère Oxy . ($\vec{\zeta}_N = \vec{0}$) . Le point $D = (\vec{\zeta}_1, \dots, \vec{\zeta}_{N-1}, \tau_1, \dots, \tau_{N-1}, \tau_N)$ appartient à la sphère unité S de l'espace à $3N - 2$ dimensions, sur laquelle l'élément d'aire est $d\Omega(D)$. D et σ représentent respectivement la direction et l'amplitude de l'ensemble des déplacements des ellipses à partir de leurs positions respectives sur le réseau solide. A l'aire A/A_0 , la fonction de partition Z_N s'écrit, (si l'on ne supprime pas les translations de l'ellipse E_N) :

$$Z_N = \frac{A}{ab} \left(\frac{a^2 b^2}{a^2 - b^2} \right)^N \int_{\sigma} 3^{N-3} d\sigma d\Omega(D) \quad (\text{II, 27}).$$

L'intégrale s'étend ici sur l'ensemble des configurations (σ, D) permises.

Nous supposons encore que le réseau solide représenté dans la Figure 2 est unique et surtout stable : σ tend uniformément vers zéro quand $A \rightarrow A_0$. Dans cette limite, en utilisant le Lemme 2, énoncé au paragraphe I - A, et les identités (I, 1), nous allons déterminer si la configuration (σ, D) est permise à la densité A_0/A .

Cherchons donc si l'ellipse E_j ne rencontre pas E_k ou l'une de ses plus proches images, (obtenues en faisant des translations parallèlement aux côtés de la boîte). Quand $A \rightarrow A_0$, σ tend uniformément vers zéro et chaque fonction $f_\alpha(\vec{r}_k - \vec{r}_j, \vec{u}_j, \vec{u}_k)$ correspondante ($\alpha = 1$ ou 2) tend uniformément vers $f_\alpha^{(0)}(\vec{R}_{jk}, \vec{u}_0, \vec{u}_0)$, qui est au plus égale à -1 selon les relations (A3, 1) et (A3, 2).

D'autre part la fonction de contact $\psi_{jk} = \psi(\vec{r}_k - \vec{r}_j, \vec{u}_j, \vec{u}_k)$ tend uniformément vers $\psi_{jk}^{(0)} = \psi(\vec{R}_{jk}^{(0)}, \vec{u}_0, \vec{u}_0)$, qui est toujours positive ou nulle. $\psi_{jk}^{(0)} = 0$ lorsque les sites $0_j^{(0)}$ et $0_k^{(0)}$ (ou leurs plus proches images) sont adjacents. Donc, quand $A \rightarrow A_0$, pour que la configuration (σ, D) soit permise, il faut et il suffit que chaque quantité ψ_{jk} associée à une paire de sites adjacents $0_j^{(0)}$ et $0_k^{(0)}$ soit positive ($j < k$).

Nous pouvons encore écrire l'égalité suivante, identique à la relation (II, 12) :

$$3^{-1} 2^{-7} \Psi_{jk} = 2 \left(\frac{A}{A_0}\right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right) - \sigma \ell_{jk}(\sigma, D, \frac{A}{A_0}) \quad (\text{II}, 28) ,$$

la fonction $\ell_{jk}(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ étant continue et indéfiniment dérivable, même pour $\sigma = 0$.

Quand A/A_0 et σ sont inférieurs à 2, toutes les quantités $\ell_{jk}(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ admettent une borne supérieure (positive) M_3 . En employant le raisonnement qui nous a servi à démontrer la relation (II, 16 a), et en utilisant l'identité (II, 27), nous prouvons l'inégalité suivante, (sans faire appel ni à l'unicité, ni à la stabilité du réseau solide) :

$$Z_N \geq K_3 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^{3N-2} \quad (\text{II}, 29 \text{ a}) ,$$

où, si Γ est le volume de la sphère unité S appartenant à l'espace à $3N-2$ dimensions :

$$K_3 = \frac{2 A_0}{a b} \left(\frac{a^2 b^2}{a^2 - b^2} \right)^N \left(\frac{2}{M_3} \right)^{3N-2} \Gamma \quad (\text{II}, 29 \text{ b}) .$$

Le nombre ν intervenant dans les expressions asymptotiques (II, 5) et (II, 4) est donc au plus égal à $3 - \frac{2}{N}$. Cherchons maintenant une borne inférieure de ν , c'est-à-dire un nombre positif t tel que Z_N vérifie la relation suivante, quand $A \rightarrow A_0$:

$$Z_N \leq K_4 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^t \quad (\text{II}, 30) ,$$

K_4 étant une constante.

Désignons par $\ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ le plus grand des $3N$ nombres $\ell_{jk}(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ correspondant à toutes les paires de sites adjacents ($j < k$). D'après les relations (II, 28), les $3N$ inégalités $\psi_{jk} > 0$ sont équivalentes à la condition suivante :

$$2 \left(\frac{A}{A_0} \right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right) - \sigma \ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0}) > 0 \quad (\text{II, 31 a}) .$$

Dans toute configuration (σ, D) permise, quand D et A/A_0 sont fixés, l'amplitude σ admet une borne supérieure précise $\sigma_M(D, \frac{A}{A_0})$, qui vérifie donc l'équation :

$$2 \left(\frac{A}{A_0} \right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1 \right) - \sigma_M \ell\left(\sigma_M, D, \frac{A}{A_0}\right) = 0 \quad (\text{II, 31 b}) .$$

La relation (II, 27) nous donne l'inégalité suivante :

$$Z_N \leq K_5 \int_S \left[\sigma_M(D, \frac{A}{A_0}) \right]^{3N-2} d\Omega(D) \quad (\text{II, 32 a}) ,$$

où, si A/A_0 est inférieur à 2 :

$$K_5 = \frac{2 A_0}{a b} \left(\frac{a^2 b^2}{a^2 - b^2} \right)^N \frac{1}{3N-2} \quad (\text{II, 32 b}) .$$

Nous rappelons que $\vec{\xi}_j$ est le vecteur (ξ_j, η_j) . Posons :

$$c_{jk} = \frac{1}{2} X'_{jk}^{(0)} \cdot Y'_{jk}^{(0)} \quad (\text{II, 33}) .$$

Quand $A \rightarrow A_0$, $\sigma \rightarrow 0$ et $\ell_{jk}(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ tend uniformément vers la fonction $L_{jk}(D)$ suivante, obtenue exactement de la même façon que la

quantité $L_j(D)$ définie par l'égalité (II, 15) :

$$L_{jk}(D) = (\vec{\zeta}_j - \vec{\zeta}_k) \cdot \vec{R}'_{jk}^{(0)} + c_{jk}(\tau_j + \tau_k) \quad (\text{II, 34}).$$

Lorsque $A \rightarrow A_0$, la fonction $\ell(\sigma, D, \frac{A}{A_0})$ tend donc vers la plus grande des quantités $L_{jk}(D)$ (associées aux $3N$ paires de sites adjacents), que nous nommons encore $L(D)$:

$$L(D) = \max'_{j < k} [L_{jk}(D)] \quad (\text{II, 35}).$$

La fonction $L(D)$ est toujours positive ou nulle car nous vérifions facilement l'identité suivante, analogue à la relation (II, 20) :

$$\sum'_{j < k} L_{jk}(D) = 0 \quad (\text{II, 36}) ;$$

(la somme s'étendant sur les paires de sites adjacents). Mais ici la quantité $L(D)$ peut s'annuler ; le système des $3N$ équations $L_{jk}(D) = 0$ admet une solution pour certaines directions D privilégiées des déplacements.

Cherchons donc une solution non nulle du système d'équations $L_{jk}(D) = 0$, où le point D n'appartient plus forcément à la sphère unité S de l'espace à $3N - 2$ dimensions, mais $\vec{\zeta}_N$ reste nul. Sur le réseau représenté dans la Figure 1, nous effectuons la transformation de Fourier ainsi définie :

$$\vec{\zeta}_j = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}'_j (0)} \vec{\zeta}(\vec{q}) \quad (\text{II, 37 a})$$

$$\tau_j = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}'_j (0)} \tau(\vec{q}) \quad (\text{II, 37 b}).$$

Les N vecteurs $\vec{q}$ font partie du réseau réciproque de la boîte contenant les N disques durs associés aux ellipses par l'affinité (II, 1), dans l'état d'empilement maximum ; (deux vecteurs $\vec{q}$ sont équivalents si leur différence appartient au réseau réciproque de celui formé par les centres des disques).

Posons, pour $\beta = 1, 2$ et 3 :

$$\zeta_\beta(\vec{q}) = \vec{\zeta}(\vec{q}) \cdot \vec{R}'_\beta (0) \quad (\text{II, 38}) ;$$

c_β est défini par l'identité (II, 14). D'après l'égalité (II, 34), le système $L_{jk}(D) = 0$ est équivalent à l'ensemble des N systèmes linéaires et homogènes suivants, associés aux vecteurs $\vec{q}$ et comprenant chacun quatre équations, qui s'écrivent (pour $1 \leq \beta \leq 3$) :

$$i \sin \left[\frac{1}{2} \vec{q} \cdot \vec{R}'_\beta (0) \right] \zeta_\beta(\vec{q}) - c_\beta \cos \left[\frac{1}{2} \vec{q} \cdot \vec{R}'_\beta (0) \right] \tau(\vec{q}) = 0 \quad (\text{II, 39 a})$$

$$\sum_{\gamma=1}^{\gamma=3} \zeta_\gamma(\vec{q}) = 0 \quad (\text{II, 39 b}).$$

Pour $\vec{q} = \vec{0}$, ce système homogène admet la solution : $\tau(\vec{0}) = 0$, $\vec{\zeta}(0)$ étant déterminée en fonction des autres composantes $\vec{\zeta}(\vec{q})$ par

l'égalité $\vec{\zeta}_N = \vec{0}$, équivalente à l'identité suivante, (car $\vec{R}'_N(0) = \vec{0}$) :

$$\sum_{\vec{q}} \vec{\zeta}(\vec{q}) = \vec{0} \quad (\text{II, 40}).$$

Pour $\vec{q} \neq \vec{0}$, le système (II, 39) aura une solution non nulle si et seulement si $\vec{q}$ vérifie l'équation :

$$\sum_{\beta=1}^{\beta=3} c_{\beta} \cotg \left[\frac{1}{2} \vec{q} \cdot \vec{R}'_{\beta}(0) \right] = 0 \quad (\text{II, 41}).$$

Considérons maintenant le réseau losange défini par les conditions (II, 3 a) et (II, 22 c). Dans ce cas, nous obtenons les valeurs des trois coefficients c_{β} , à l'aide des égalités (II, 21) :

$$c_1 = 0, \quad c_2 = -c_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2} \quad (\text{II, 42}).$$

Si q_x et q_y sont les composantes du vecteur $\vec{q}$ dans le repère Oxy, l'équation (II, 41) admet les $2 N_x - 1$ solutions $\vec{q}^{(m)}$ suivantes, ($m = 1, 2, \dots, 2 N_x - 1$) :

$$q_x^{(m)} = m \pi / N_x, \quad q_y^{(m)} = 0 \quad (\text{II, 43}).$$

Soit $\vec{u}'_0$ le vecteur unitaire de l'axe Oy. En regroupant les solutions des systèmes (II, 39) associés aux vecteurs $\vec{q}^{(m)}$ et $-\vec{q}^{(m)}$, nous obtenons les $2 N_x - 1$ solutions réelles indépendantes du système $L_{jk}(D) = 0$ (avec $\vec{\zeta}_N = \vec{0}$), qui s'écrivent ainsi, au moyen des phases $\Phi_j^{(\mu)}$ suivantes ($\mu = 1, 2, \dots, 2 N_x - 1$) :

$$\phi_j^{(\mu)} = \vec{q}^{(m)} \cdot \vec{R}_j^{(0)} + \phi_\mu = \frac{m \pi}{N_x} \cdot \frac{1}{a} X_j^{(0)} + \phi_\mu \quad (\text{II, 44 a})$$

$$\vec{\zeta}_j^{(\mu)} = \frac{1}{2} A_\mu \cotg \left(\frac{m \pi}{2 N_x} \right) \left[\sin \phi_j^{(\mu)} - \sin \phi_\mu \right] \vec{u}'_0 \quad (\text{II, 44 b})$$

$$\tau_j^{(\mu)} = A_\mu \cos \phi_j^{(\mu)} \quad (\text{II, 44 c})$$

le nombre entier m décrit ici l'intervalle $\left[1, N_x\right]$; $\phi_\mu = 0$ ou $\pi/2$, pour $1 \leq m < N_x$; $\phi_\mu = 0$ si $m = N_x$; le coefficient réel A_μ est une constante de normalisation.

Désignons ici par I l'origine de l'espace à $3 N - 2$ dimensions. Dans celui-ci les vecteurs $\vec{ID}_1$ tels que la quantité $L(D_1) = L(\vec{I} D_1)$ soit nulle engendrent donc un sous-espace vectoriel V_1 à $\delta_1 = 2 N_x - 1$ dimensions. En continuant le développement (II, 31 b) en série de puissances de σ_M , on prouverait que l'amplitude maximum σ_M de l'ensemble des déplacements des ellipses, dans la direction D , est un infiniment petit d'ordre inférieur ou égal à celui de $\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^{\frac{1}{2}}$, quand $\vec{ID}$ appartient à la variété linéaire V_1 ($ID = 1$), tandis que σ_M est de l'ordre de $\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)$ dans toute autre direction D .

Dans la limite où A tend vers A_0 , nous avons donc montré l'existence de directions le long desquelles l'amplitude maximum de l'ensemble des déplacements des ellipses, à partir de leurs positions respectives sur le réseau solide, est anormalement grande. Dans toutes

ces directions privilégiées $\vec{ID}$, engendrées par les $2 N_x - 1$ modes collectifs statiques (II, 44), nous remarquons que les déplacements des centres des ellipses sont perpendiculaires à la direction initiale Ox de leurs grands axes.

Nous voulons trouver le nombre t , intervenant dans l'inégalité (II, 30), au moyen des relations (II, 32 a) et (II, 31 b). Quand $A \rightarrow A_0$, la fonction $\ell(\sigma_M, D, \frac{A}{A_0})$ tend vers $L(D)$ uniformément. Tout nombre t , tel que l'intégrale $\int_S [L(D)]^{-t} d\Omega(D)$ converge, convient donc ici. Etudions donc cette intégrale.

Si D est un point quelconque de l'espace à $3 N - 2$ dimensions, nous pouvons écrire l'égalité suivante :

$$\vec{ID} = \vec{ID}_1 + \vec{ID}_2 \quad (\text{II, 45 a}),$$

où $\vec{ID}_1$ est contenu dans V_1 et $\vec{ID}_2$ appartient à l'espace vectoriel V_2 orthogonal à V_1 ; (le nombre de dimensions de V_2 est donc $\delta_2 = 3 N - 1 - 2 N_x$). Désignons par $\vec{\mu}_\alpha$ le vecteur unitaire associé à $\vec{ID}_\alpha$ ($\alpha = 1$ ou 2). Des relations (II, 35) et (II, 34), nous déduisons l'identité suivante :

$$L(D) = L(\vec{ID}) = ID_2 \cdot L(\vec{\mu}_2) \quad (\text{II, 45 b}),$$

le minimum de la fonction continue $L(\vec{\mu}_2)$ étant positif.

Comme l'extrémité du vecteur $\vec{\mu}_\alpha$ décrit la sphère unité de l'espace vectoriel V_α à δ_α dimensions, sur laquelle l'élément d'aire est $d\Omega_\alpha$, nous obtenons l'égalité suivante :

$$\int_S [L(D)]^{-t} d\Omega(D) = \int F(D_2) (ID_2)^{\delta_2 - 1 - t} d(ID_2) d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (\text{II, 46 a}),$$

où :

$$F(D_2) = [L(\vec{\mu}_2)]^{-t} (1 - ID_2^2)^{\frac{1}{2} \delta_1 - 1} \quad (\text{II, 46 b}) ;$$

(ID_2 est compris entre 0 et 1). Comme la fonction positive $F(D_2)$ est bornée supérieurement, l'intégrale (II, 46 a) converge quand t est inférieur à $\delta_2 = 3N - 1 - 2N_x$. Donc, selon les relations (II, 29 a) et (II, 30), le nombre ν figurant dans les expressions asymptotiques (II, 5) et (II, 4) vérifie les inégalités suivantes :

$$3 - \frac{1}{N} - \frac{2N_x}{N} \leq \nu \leq 3 - \frac{2}{N} \quad (\text{II, 47}) .$$

Toute la démonstration précédente s'applique naturellement au cas où le réseau solide est défini par les relations (II, 3 b) et (II, 22 d), à condition de permuter les axes Ox et Oy , les vecteurs unitaires $\vec{u}_0$ et $\vec{u}'_0$, les nombres N_x et N_y , ainsi que a et b .

Quand $N \rightarrow +\infty$, les expressions asymptotiques (II, 4) et (II, 5) restent sans doute valables, (dans un intervalle de densités dont la longueur ne tend pas vers zéro, pour une précision fixée), et le nombre ν devient égal à 3.

III - LE CALCUL DE MONTE-CARLO

Pour étudier le système d'ellipses dures à l'équilibre, nous employons la méthode de Monte-Carlo [4] dans l'ensemble canonique, avec les conditions aux limites périodiques. Nous pouvons éliminer les configurations interdites du système grâce au Lemme 2, énoncé au paragraphe I-A, qui fait intervenir principalement la fonction de contact $\Psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b)$ de deux ellipses, définie par les relations (I, 1). La connaissance de cette fonction et l'inégalité (I, 14) vont nous permettre aussi de calculer la pression.

A - DETERMINATION DE LA PRESSION

Désignons par $\vec{r}_j$ le vecteur position du centre de la $j^{\text{ème}}$ ellipse et par $\vec{u}_j$ le vecteur unitaire de son grand axe. Nous posons : $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$. Le gradient de toute fonction $F(\vec{r}_{ij}, \vec{u}_i, \vec{u}_j)$ par rapport à $\vec{r}_{ij}$ sera noté $\vec{v}_{ij}F$.

Par application directe du théorème du viriel [10], nous allons démontrer que le facteur de compressibilité PA/NkT est la limite

de la quantité $Z(\Psi_0)$ suivante, quand le nombre positif Ψ_0 tend vers zéro :

$$Z(\Psi_0) = 1 + \frac{1}{2 N \Psi_0} \left\langle \sum_{i < j} \left| \vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{ij} \Psi \right| \right\rangle \quad (\text{III, 1 a}) ;$$

dans chaque configuration permise, la somme s'étend sur toutes les paires d'ellipses E_i et E_j ($i < j$) telles que la fonction de contact

$\chi(\vec{r}_{ij}, \vec{u}_i, \vec{u}_j; a, b)$ soit inférieure à Ψ_0 , compte tenu aussi des images de E_j ; nous prenons la moyenne de cette somme sur toutes les configurations permises. Nous pouvons donc écrire :

$$\frac{P A}{N k T} = \lim_{\Psi_0 \rightarrow 0^+} Z(\Psi_0) \quad (\text{III, 1 b}).$$

1 - Application du théorème du viriel

Supposons d'abord que le potentiel d'interaction des molécules nos i et j , $V_{ij} = V(\vec{r}_{ij}, \vec{u}_i, \vec{u}_j)$, soit partout continu ainsi que ses dérivées premières. L'application directe du théorème du viriel [10] nous donne l'égalité suivante :

$$\frac{P A}{N k T} = 1 - \frac{1}{4 N k T} \left\langle \sum_{i \neq j} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{ij} V \right\rangle \quad (\text{III, 2}),$$

la moyenne étant toujours évaluée dans l'ensemble canonique.

Soit $\rho_{12} = \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{u}_1, \vec{u}_2)$ la fonction de distribution à deux corps, dépendant des angles θ_1 et θ_2 formés par $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ avec un

axe fixe Ox. Nous définissons la fonction $\gamma_{12} = \gamma(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{u}_1, \vec{u}_2)$ par la relation suivante, (où $\beta = 1/kT$) :

$$\rho_{12} = e^{-\beta V_{12}} \gamma_{12} \quad (\text{III, 3 a}).$$

L'identité (III, 2) s'écrit donc :

$$\frac{P}{NkT} = 1 + \frac{1}{4N} \int \gamma_{12} \vec{r}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{12} (e^{-\beta V}) d_2 \vec{r}_1 d_2 \vec{r}_2 d\theta_1 d\theta_2 \quad (\text{III, 3 b}) ;$$

les centres O_1 et O_2 des molécules $n^{\text{os}} 1$ et 2 parcourent ici l'intérieur de la boîte contenant le système, θ_1 et θ_2 varient de 0 à 2π .

Maintenant faisons tendre le potentiel $V(\vec{r}_{12}, \vec{u}_1, \vec{u}_2)$ vers $+\infty$ quand les ellipses E_1 et E_2 , ou leurs images, se rencontrent, et vers zéro dans le cas contraire. Dans cette limite, la fonction γ_{12} reste partout continue, à l'inverse de V_{12} et de ρ_{12} . Nous remarquons que la quantité $e^{-\beta V_{12}}$ égale la fonction de Heaviside $Y(\Psi_{12})$, sauf quand les ellipses E_1 et E_2 se coupent avec une valeur positive de leur fonction de contact Ψ_{12} , ou sont tangentes intérieurement (Table I figurant au paragraphe I-C) ; nous excluons ce dernier cas des domaines d'intégration.

Dans ces conditions, l'égalité (III, 3 b) s'écrit ainsi :

$$\frac{P}{NkT} = 1 + \frac{1}{4N} \int \gamma_{12} |\vec{r}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{12} \Psi| \delta(\Psi_{12}) d_2 \vec{r}_1 d_2 \vec{r}_2 d\theta_1 d\theta_2 \quad (\text{III, 4}) ;$$

dans cette intégrale, grâce à la fonction de Dirac $\delta(\Psi_{12})$, nous avons pu

remplacer le produit scalaire $\vec{r}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{12} \Psi$, positif quand les ellipses E_1 et E_2 sont tangentes extérieurement (Appendice 4), par sa valeur absolue, qu'il est préférable d'utiliser dans le calcul de la pression, où l'on accumule ainsi des grandeurs positives.

Or, quand le nombre positif Ψ_0 tend vers zéro, $\delta(\Psi)$ est la limite de la fonction $\frac{1}{\Psi_0} [Y(\Psi) - Y(\Psi - \Psi_0)]$, qui vaut $\frac{1}{\Psi_0}$ lorsque Ψ est comprise entre 0 et Ψ_0 , et est nulle ailleurs. D'autre part, selon l'égalité (III, 3 a), $\gamma_{12} = \rho_{12}$ quand les ellipses E_1 et E_2 ne se rencontrent pas. Grâce à ces remarques, nous obtenons les relations (III,1).

2 - Le calcul numérique de la pression

Comme les erreurs statistiques du calcul de Monte-Carlo rendent très difficile l'évaluation de la limite (III, 1 b), nous avons identifié PA/NkT à la quantité $Z(\Psi_0)$, définie par l'égalité (III, 1 a), pour certaines valeurs de Ψ_0 .

Dans la détermination de $Z(\Psi_0)$, grâce à l'inégalité (I, 14), seules peuvent intervenir les paires d'ellipses E_i et E_j ($i < j$), compte tenu aussi des images de E_j , telles que la distance de leurs centres soit inférieure à la longueur $r_0 > 2a$, associée à la valeur maximum Ψ_0 de leur fonction de contact Ψ_{ij} par la relation suivante :

$$\Psi_0 = \Psi_d\left(\frac{r_0}{a}\right) \quad (\text{III, 5}),$$

où Ψ_d est la fonction de contact des disques, définie par l'identité (I,13).

La quantité $\frac{r_0}{2a} - 1$, correspondant à des disques de rayon a , nous permet d'apprécier la grandeur du nombre Ψ_0 intervenant dans la limite (III, 1 b).

A la densité A_0/A , la fonction de contact associée à deux ellipses adjacentes du réseau solide égale la quantité $\Psi_L(A/A_0)$ suivante, déterminée dans l'Appendice 3 :

$$\Psi_L = 3 \cdot 2^8 \left(\frac{A}{A_0}\right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right) \quad (\text{III, 6}).$$

Pensant vérifier l'expression asymptotique (II, 4) et surtout déterminer le nombre ν correspondant, nous avons choisi la valeur $\Psi_0 = 10^{-2} \Psi_L$ à haute densité ($A/A_0 < 1,30$). Mais les erreurs statistiques du calcul de Monte-Carlo nous ont empêché d'obtenir une détermination suffisamment précise de la limite (III, 1 b) et de la constante ν .

A de plus faibles densités ($A/A_0 \geq 1,40$), nous avons considéré notamment la valeur $\Psi_0 = 15,36$, pour laquelle $\frac{r_0}{2a} - 1 \approx 10^{-2}$, et le pas Ψ_0 quadruple, donnant une erreur statistique deux fois moindre sur la quantité $Z(\Psi_0)$, tout en la modifiant très légèrement.

B - AUTRES ASPECTS TECHNIQUES DU CALCUL

A la densité A_0/A , nous plaçons les N ellipses dans une boîte rectangulaire compatible avec l'un des réseaux solides définis, (à la densité maximum), par les conditions (II, 3 a) et (II, 3 b), les dimensions de la boîte étant respectivement données par les relations (II, 22 c) ou (II, 22 d). Nous utilisons les conditions aux limites

périodiques. D'autre part nous prenons la boîte presque carrée, afin de gêner le moins possible une désorientation éventuelle du système d'ellipses.

A chaque pas pair du calcul de Monte-Carlo [4], nous déplaçons au hasard les N ellipses, l'une après l'autre et dans l'ordre, sans modifier leur orientation. Par contre, à tout pas impair, nous faisons tourner au hasard chaque ellipse autour de son centre, toujours dans l'ordre. Nous pouvons ainsi choisir l'amplitude maximum des déplacements, (parallèles aux côtés de la boîte), et l'angle de rotation maximum afin qu'une nouvelle configuration sur deux, engendrée respectivement par chaque translation ou par chaque rotation, soit en moyenne permise. (Cette dernière condition donne la plus grande vitesse de convergence du calcul).

Au cours du calcul, nous déterminons essentiellement la pression, par la méthode indiquée au paragraphe précédent, et les deux autres grandeurs suivantes :

- le facteur de structure $S(\vec{q})$, où $\vec{q}$ est l'un des vecteurs de base $\vec{q}_1$ et $\vec{q}_2$ du réseau réciproque associé au réseau solide, (nous avons pris $\vec{q}_1$ et $\vec{q}_2$ symétriques par rapport à l'un des côtés de la boîte) :

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j\ell} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_\ell)} \right\rangle \quad (\text{III, 7}).$$

Dans chaque configuration, les indices j et ℓ varient indépendamment de 1 à N , $\vec{r}_j$ étant le vecteur position du centre de la j^{ème} ellipse ;

nous prenons la moyenne sur l'ensemble des configurations permises. $S(\vec{q})$ égale N dans l'état solide parfaitement ordonné et prend une valeur de l'ordre de l'unité quand le réseau solide considéré est détruit.

- Le paramètre d'ordre angulaire M , que nous définissons ainsi :

$$M = \frac{1}{N^2} < \sum_{j\ell} \cos (2\theta_j - 2\theta_\ell) > \quad (\text{III}, 8),$$

θ_j étant l'angle formé par le grand axe de la $j^{\text{ème}}$ ellipse avec une direction fixe Ox . La quantité positive M , invariante par rotation, atteint sa valeur maximum 1 quand les ellipses sont complètement orientées, et est de l'ordre de $1/N$ dans un état désorienté.

Rappelons que l'ordre directionnel, (comme l'ordre solide), ne se maintient sans doute pas à grande distance, dans ce modèle continu à deux dimensions [6]. C'est un ordre à moyenne distance, s'étendant sur quelques centaines d'ellipses.

Tous les calculs, dont nous allons analyser les résultats au chapitre IV, ont été effectués sur la machine UNIVAC 1108 d'Orsay.

C - DIFFICULTES RENCONTREES DANS LE CAS DES ELLIPSOÏDES DURS

L'étude des transitions de phase d'un système constitué par N ellipsoïdes durs de révolution (égaux) présente un grand intérêt, car on doit sans doute observer une différence notable entre le comportement

des ellipsoïdes allongés suivant leur axe de révolution ($a > b$) et celui des ellipsoïdes aplatis ($a < b$), les sphères dures se situant entre ces deux espèces d'ellipsoïdes. Grâce au Lemme 7, énoncé au paragraphe I-G, nous pouvons en principe appliquer la méthode de Monte-Carlo, pour déterminer les moyennes à l'équilibre de grandeurs faisant seulement intervenir les positions des ellipsoïdes, comme la fonction de paire dépendant des angles $g(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2)$, le facteur de structure, ou un paramètre d'ordre directionnel.

Mais les relations analogues aux égalités (III, 1), où l'on remplace notamment la fonction de contact Ψ des ellipses par celle des ellipsoïdes, $\Phi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b)$, ne nous permettent plus de calculer facilement la pression, à cause du Lemme 9, énoncé également au paragraphe I-G.

En particulier, l'inégalité (I, 14) ne sert plus ici, car Φ s'annule partout dans le cas des sphères. La distance correspondant à la longueur r_0 , introduite au moyen de la relation (III, 5), est maintenant infinie. Plus précisément, dans la somme (III, 1 a), la paire d'ellipsoïdes E_i et E_j peut intervenir un nombre de fois aussi grand que l'on veut, à cause de leurs images, comme on le voit en prenant par exemple une configuration permise telle que les axes de révolution de E_i et E_j soient presque parallèles. (Dans le cas où l'on utilise les conditions aux limites rigides, r_0 égale environ le plus grand diamètre de la boîte).

Mais nous remarquons que la fonction $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Phi = r \frac{\partial \Phi}{\partial r}$ est nulle dans tous les cas particuliers envisagés dans le Lemme 9. Probablement,

quand la borne supérieure ψ_0 de Φ tend vers zéro, les paires d'ellipsoïdes prépondérantes dans la somme (III, 1 a) sont celles dont la distance des centres, compte tenu des images, est inférieure à une longueur d tendant vers $\max(2a, 2b)$. Il faudrait donc étudier en détail ce dernier comportement, pour déterminer la pression.

IV - LES DEUX TRANSITIONS DE PHASE

Nous avons essentiellement étudié un système comprenant 170 ellipses dures, de rapport a/b égal à 6, enfermées dans la boîte presque carrée compatible avec le réseau solide défini par les conditions (II, 3a) et (II, 22c), où $N_x = 5$ et $N_y = 34$. Quand nous diminuons la densité à partir de sa valeur maximum, nous observons d'abord l'état solide orienté, puis l'état nématique, dans lequel les ellipses restent toujours orientées tandis que leurs centres sont désordonnés, enfin l'état liquide, où l'ordre directionnel a aussi disparu. Deux transitions de phase du premier ordre séparent ces états.

A - LA FUSION

Pour un nombre N d'ellipses à peu près constant et une forme de boîte presque fixe, la densité de fusion A_0/A_f croît quand a/b augmente ; (nous considérons le début de la fusion). En effet, à densité A_0/A donnée, plus a/b est grand, plus les réseaux solides représentés dans la Figure 2, (et dilatés), peuvent être distincts les uns des autres ; (on peut mesurer

cette différence à l'aide du facteur de structure). Or les portions de ces réseaux se déduisent les unes des autres par des glissements, plus faciles que des rotations dans la boîte, (avec les conditions aux limites périodiques). A densité A_0/A donnée, pour un nombre N d'ellipses et une forme de boîte à peu près fixes, le réseau initial est donc en moyenne d'autant plus déformé que a/b est plus élevé.

Lorsque $N \rightarrow +\infty$, la densité de fusion A_0/A_f devient sans doute une fonction croissante de a/b , indépendante de la forme de la boîte. En particulier, quand $a/b \rightarrow +\infty$, les phases solide et liquide disparaissent, en étant remplacées par la phase nématique : $A_f \rightarrow A_0$.

A l'aire $A/A_0 = 1,15$, nous avons nettement observé le passage graduel du système de l'état solide à l'état nématique. Au bout de 70.000 pas du calcul de Monte-Carlo, la pression PA_0/NkT moyennée chaque fois sur 10.000 pas consécutifs, (soient $1,7 \times 10^6$ configurations), a augmenté de 18,8 à 22, tandis que le facteur de structure moyen $\frac{1}{2} [S(\vec{q}_1) + S(\vec{q}_2)]$, défini par l'égalité (III,7), a diminué régulièrement de 70 à 10 (Figure 3). (Le choix de la quantité positive Ψ_0 , utilisée pour le calcul de la pression, a été décrit dans le paragraphe III-A-2; d'ailleurs en multipliant Ψ_0 par des nombres variant entre $\frac{1}{2}$ et 4, nous observons toujours cette augmentation très nette de la pression).

Par contre le solide ne fond sans doute pas à l'aire $A/A_0 = 1,125$, où les facteurs de structure $S(\vec{q}_1)$ et $S(\vec{q}_2)$, moyennés chaque fois sur 10.000 pas successifs, sont restés tous deux égaux à 110 ± 10 , au cours de 40.000 pas de calcul.

Nous avons pu suivre la branche nématique de l'isotherme à partir de l'aire $A/A_0 = 1,15$ et continuer à parcourir la branche solide (Figure 4). L'équation d'état du système à haute densité ($1,10 \leq A/A_0 < 1,30$) figure dans la Table II,

A/A_0	état solide		état nématique	
	nombre de pas	PA_0/NkT	nombre de pas	PA_0/NkT
1,10	20.000	$27,6 \pm 0,3$		
1,125	40.000	$22,0 \pm 0,1$		
1,15	10.000	18,8	30.000	$21,9 \pm 0,2$
1,175	10.000	16,7	20.000	$19,1 \pm 0,2$
1,20	30.000	$15,2 \pm 0,3$	20 000	$15,8 \pm 0,2$
1,225			20.000	$14,0 \pm 0,4$
1,25			20.000	$12,7 \pm 0,4$
1,275			10.000	11,2

Table II. L'équation d'état à haute densité.

où nous avons porté le nombre de pas de chaque calcul ; l'erreur commise sur PA_0/NkT a été essentiellement estimée à l'aide de la déviation standard de la pression moyennée chaque fois sur 10.000 pas consécutifs.

L'aire A_f/A_0 correspondant au début de la fusion est donc inférieure à 1,15, (sinon très voisine de ce nombre), alors qu'elle vaut déjà 1,266 pour un système de 870 disques durs [5] .

B - LA TRANSITION NEMATIQUE-LIQUIDE

A l'aire $A/A_0 = 1,40$, un calcul de 80.000 pas nous a donné la valeur suivante du paramètre d'ordre angulaire, défini par la relation (III, 8) : $M = 0,7 \pm 0,1$, tandis que $S(\vec{q}) = 0,8 \pm 0,4$. Le système se trouve dans un état de type nématique, où les ellipses sont encore très orientées alors que leurs centres sont complètement désordonnés.

Le passage de la phase nématique à la phase liquide se fait par une transition du premier ordre car le déblocage des angles de rotation θ_j , associé à cette transition, est accompagné par un accroissement brutal du volume de l'espace de configuration, donc de l'entropie. C'est un effet géométrique semblable au déblocage des positions intervenant dans la fusion des disques.

Mais comme un seul degré de liberté par ellipse entre en jeu dans la désorientation, au lieu de deux dans la fusion, les branches nématique et liquide de l'isotherme sont peu éloignées l'une de l'autre. Dans la région de transition, le système passe très rapidement de l'état nématique à l'état liquide et inversement, au cours du calcul, et il est très difficile d'établir une corrélation entre la variation de la pression et celle du paramètre d'ordre angulaire M .

Cependant nous avons pu observer la boucle de Van der Waals associée à la transition de désorientation (Figure 5). C'est en calculant la pression avec le pas $\Psi_0 = 61,44$, (défini au paragraphe III-A-2), que nous avons réussi à construire quelques points de cette boucle. Avec le pas $\Psi_0 = 15,36$, quatre fois plus faible, nous avons justement obtenu des fluctuations anormales de la pression, nous empêchant d'y construire l'isotherme en un temps de calcul raisonnable.

Dans l'intervalle d'aires $1,40 \leq A/A_0 \leq 2,05$, nous avons vérifié que les valeurs de PA_0/NkT déterminées avec les deux pas Ψ_0 sont bien identiques dans la limite des erreurs statistiques. En multipliant le pas $\Psi_0 = 15,36$ par 4, nous avons pu ainsi réduire ces erreurs statistiques de moitié et localiser la boucle de Van der Waals.

D'autre part, le test statistique de Student [11] nous montre qu'il y a moins de quinze chances sur cent pour que la pression diminue effectivement quand l'aire A/A_0 croît de 1,775 à 1,7875. (Pour appliquer ce test, nous supposons que les moyennes de la pression, déterminées chacune sur 10.000 pas consécutifs de calcul, sont presque indépendantes les unes des autres ; nous prenons encore $\Psi_0 = 61,44$).

La transition de désorientation (Figure 5) commence à l'aire $A_d/A_0 = 1,775 \pm 0,025$. La variation relative d'aire $\Delta A/A$ à la transition est sans doute comprise entre 1% et 2% ; la variation d'entropie correspondante $\Delta S/Nk$, comprise entre 5% et 12%, est donc nettement inférieure à l'entropie de fusion des disques [5], qui vaut 0,36.

Nous avons aussi appliqué un champ magnétique H interagissant avec le système d'ellipses par le potentiel suivant :

$$V = - H^2 \sum_{j=1}^{j=N} \cos 2 \theta_j \quad (\text{IV, 1}),$$

où θ_j est l'angle du grand axe de la $j^{\text{ème}}$ ellipse avec la demi-droite Ox parallèle à l'un des côtés de la boîte.

Pour $\beta H^2 = 4$ (avec $\beta = 1/kT$), les fluctuations anormales précédentes de la pression disparaissent complètement, ainsi que la transition (Figure 5), dans l'intervalle $1,40 \leq A/A_0 \leq 2,0$. L'application d'un champ magnétique H , qui oriente les ellipses d'autant plus efficacement que la densité est plus faible, supprime certainement la transition de désorientation, (bien que la boucle de Van der Waals associée à cette transition, en champ magnétique nul, subsiste pour des valeurs suffisamment basses du champ magnétique $|H|$, valeurs d'autant plus faibles que le nombre N d'ellipses est plus grand). Avec un calculateur très puissant, l'application d'un champ magnétique, qui stabilise la phase nématique, serait d'ailleurs une méthode très précise de détermination de l'énergie libre, même dans la région de transition.

D'autre part l'aire Af/A_0 du début de la fusion est certainement une fonction croissante de $|H|$, quels que soient le rapport a/b , le nombre N d'ellipses et la forme du réseau solide. En particulier, quand $H \rightarrow +\infty$, tous les grands axes des ellipses deviennent parallèles à Ox et le modèle se comporte exactement comme un système de N disques durs, d'après l'affinité (II, 1).

L'équation d'état du système d'ellipses aux moyennes densités ($1,40 \leq A/A_0 \leq 2,0$) figure dans la Table III, où nous avons aussi porté le nombre de pas de chaque calcul. La quantité Ψ_0 , avec laquelle nous avons

A/A_0	$H = 0$		$\beta H^2 = 4$	
	nombre de pas	PA_0/NkT	nombre de pas	PA_0/NkT
1,40	80.000	$7,00 \pm 0,07$	20.000	$6,52 \pm 0,05$
1,45	20.000	$6,15 \pm 0,15$	10.000	$5,74 \pm 0,07$
1,50	20.000	$5,31 \pm 0,15$	10.000	$4,91 \pm 0,07$
1,55	20.000	$4,70 \pm 0,10$	10.000	$4,26 \pm 0,07$
1,60	30.000	$4,33 \pm 0,10$	10.000	$3,82 \pm 0,07$
1,65	70.000	$4,04 \pm 0,07$	10.000	$3,42 \pm 0,07$
1,675	40.000	$3,84 \pm 0,05$		
1,70	50.000	$3,69 \pm 0,05$	10.000	$3,14 \pm 0,07$
1,725	40.000	$3,55 \pm 0,05$		
1,75	80.000	$3,43 \pm 0,05$	10.000	$2,85 \pm 0,07$
1,775	80.000	$3,28 \pm 0,05$		
1,7875	80.000	$3,34 \pm 0,05$		
1,80	80.000	$3,28 \pm 0,05$	10.000	$2,54 \pm 0,07$
1,825	80.000	$3,14 \pm 0,05$		
1,85	40.000	$3,02 \pm 0,08$	10.000	$2,39 \pm 0,07$
1,875	40.000	$2,96 \pm 0,08$		
1,90	40.000	$2,84 \pm 0,08$	10.000	$2,29 \pm 0,07$
1,925	20.000	$2,76 \pm 0,10$		
1,95	20.000	$2,67 \pm 0,10$	10.000	$2,04 \pm 0,07$
2,00	30.000	$2,48 \pm 0,10$	20.000	$1,93 \pm 0,05$
2,05	20.000	$2,32 \pm 0,10$		

Table III. L'équation d'état à moyenne densité.

déterminé la pression, vaut 61,44 en champ H nul, et 15,36 pour $\beta H^2 = 4$. (Dans ce dernier cas PA_0/NkT diminue de 0,1 au maximum quand on multiplie ψ_0 par 4). L'erreur statistique commise sur PA_0/NkT a été essentiellement estimée à l'aide de la déviation standard de la pression moyennée chaque fois sur 10.000 pas consécutifs de calcul, (soient $1,7 \times 10^6$ configurations), en champ H nul, et sur 5.000 pas successifs pour $\beta H^2 = 4$.

La variation du paramètre d'ordre angulaire M, défini par l'égalité (III, 8), est représentée dans la Figure 6, pour $H = 0$ et pour $\beta H^2 = 4$. En champ H nul, nous n'avons pas réussi à obtenir une détermination suffisamment précise de M, car les fluctuations statistiques du paramètre d'ordre angulaire ont une plus grande amplitude (relative) que les fluctuations de la pression, et s'étendent sur un nombre de pas de calcul au moins huit fois plus élevé.

Cette différence de comportement entre M et la pression peut être expliquée de la manière suivante : dans une configuration donnée, toutes les ellipses contribuent simultanément à la détermination du paramètre d'ordre angulaire tandis que seules les paires d'ellipses voisines interviennent dans le calcul de la pression, en étant très souvent presque indépendantes les unes des autres.

Juste après la transition nématique-liquide, il semble malgré tout subsister une faible orientation résiduelle des ellipses, due à la petite taille du système.

C - ETATS DU SYSTEME AUX FAIBLES ET AUX TRES GRANDS ALLONGEMENTS

Si le rapport a/b est assez voisin de l'unité, quand on abaisse la densité à partir de sa valeur maximum, le système se désoriente avant de fondre. Nous observons un état analogue à l'état cristal plastique [12, 13], où les ellipses sont complètement désorientées tandis que leurs centres occupent les sites d'un réseau solide. (Mais, dans la phase cristal plastique, les degrés de liberté de rotation des molécules prennent des valeurs discrètes).

Pour observer cet état, nous avons étudié un système comprenant 168 ellipses de rapport a/b égal à 1,01, à l'aire $A/A_0 = 1,15$. (La boîte, presque carrée, était compatible avec le réseau solide défini par les conditions (II, 3 b) et (II, 22 d), les nombres N_x et N_y valant respectivement 14 et 12). A cette densité, au cours de 30.000 pas de calcul, (soient $5,04 \times 10^6$ configurations), les facteurs de structure $S(\vec{q}_1)$ et $S(\vec{q}_2)$, moyennés chaque fois sur 10.000 pas consécutifs, sont restés égaux à 140 ± 10 , tandis que le paramètre d'ordre angulaire a pris la très faible valeur moyenne suivante : $M = 0,006 \pm 0,001$. A l'aire $A/A_0 = 1,15$, ce système d'ellipses est donc complètement désorienté bien que le solide n'ait pas encore fondu.

Cependant, quand $a/b \rightarrow +\infty$, la fusion apparaît sans doute à une densité infiniment voisine de la densité maximum, et la désorientation commence à une aire relative A_d/A_0 infiniment grande, de sorte que seule la phase nématique subsiste. Comme nous allons maintenant le prouver, dans

le cas de N ellipses infiniment longues, l'aire relative A/A_0 du début (ou de la fin) de la transition nématique-liquide est un infiniment grand équivalent à l'expression $\frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{a}{b} \frac{A_{hr}}{N}$, où A_{hr} est l'aire correspondante de la transition de désorientation présentée sans doute par N bâtons durs infiniment minces de longueur 2, placés dans une boîte de même forme que celle contenant les ellipses, avec également les conditions aux limites périodiques. (Nous devons remarquer que cette transition des bâtons durs n'est pas forcément du premier ordre).

Considérons donc un système composé de N ellipses. Désignons par $\vec{r}_j$ le vecteur position du centre de l'ellipse E_j relativement à l'origine 0. Faisons tendre a vers l'infini en fixant b . Posons :

$$\vec{r}_j = a \vec{\rho}_j \quad (\text{IV, 2 a})$$

$$\vec{\rho} = \vec{\rho}_2 - \vec{\rho}_1 \quad (\text{IV, 2 b}).$$

Dans cette limite, en utilisant le Lemme 2, énoncé au paragraphe I-A, et les relations (I, 1), cherchons si les ellipses E_1 et E_2 , par exemple, se rencontrent. Quand $a \rightarrow +\infty$, les fonctions f_α ($\alpha = 1$ ou 2) sont presque partout des infiniment grands équivalents à

$$\frac{a^2}{b^2} \left[\sin^2 \theta - (\vec{\rho} \cdot \vec{u}'_\alpha)^2 \right], \text{ et la fonction de contact } \psi \text{ est un infiniment grand équivalent à } 3 f_1^2 f_2^2.$$

Donc, dans cette limite, pour que les ellipses E_1 et E_2 se rencontrent, il faut et il suffit que les deux quantités $\sin^2 \theta - (\vec{\rho} \cdot \vec{u}'_\alpha)^2$

soient positives ou nulles. C'est justement la condition d'intersection des deux bâtons infiniment minces de longueur 2, respectivement parallèles à $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$, et dont les centres ont pour vecteurs position $\vec{\rho}_1$ et $\vec{\rho}_2$. Nous associons ainsi N bâtons durs aux ellipses.

D'après l'égalité (IV, 2a), si la transition de désorientation des N bâtons durs commence à l'aire A_{hr} , celle des ellipses débute à l'aire A_d , qui est un infiniment grand équivalent à $a^2 A_{hr}$. (Nous pouvons déterminer A_d précisément à l'aide de la construction de Maxwell). Nous trouvons ainsi le comportement de l'aire relative A_d/A_0 quand $a/b \rightarrow +\infty$, en utilisant l'identité (II, 2), où $\rho_0 = N/A_0$.

D'autre part, comme nous l'avons déjà remarqué à la fin du chapitre II, les expressions asymptotiques (II, 4) et (II, 5) restent sans doute valables lorsque $N \rightarrow +\infty$; le nombre ν y devient alors égal à 3, indépendamment de a/b . Mais la longueur de l'intervalle d'aires A/A_0 où ces expressions asymptotiques sont valables, avec une précision minimum donnée, tend donc vers zéro quand $a/b \rightarrow 1$ ou lorsque $a/b \rightarrow +\infty$.

C O N C L U S I O N

Dans le système composé de 170 ellipses dures de rapport a/b égal à 6, nous avons donc mis en évidence deux transitions de phase du premier ordre :

- la transition solide-nématique, commençant à une densité A_0/A_f notablement supérieure à celle du début de la fusion pour les disques durs ;
- la transition nématique-liquide commençant à l'aire $A/A_0 = 1,775 \pm 0,025$; la variation d'entropie correspondante $\Delta S/Nk$ est 3 à 7 fois plus faible que l'entropie de fusion des disques.

Cette étude suggère que, dans la nature, la transition nématique-liquide, tout comme la fusion, pourrait être due surtout à des facteurs géométriques.

D'autre part nous avons analysé le comportement de tout système d'ellipses dures à très haute densité. Dans le chapitre II, nous avons prouvé que le nombre ν figurant dans les expressions asymptotiques (II, 4) et (II, 5) est voisin de 3 pour de grandes valeurs de N .

Quand $A \rightarrow A_0$, pour certains types de réseaux solides, nous avons montré l'existence de "directions" privilégiées le long desquelles les

déplacements des ellipses sont des infiniment petits d'ordre au plus égal à celui de $\left(\frac{A}{A_0} - 1\right)^{\frac{1}{2}}$, au lieu d'être du même ordre que $\frac{A}{A_0} - 1$, comme dans le cas général. Les "directions" privilégiées sont engendrées par des modes collectifs statiques indépendants, dont le nombre est de l'ordre de $\sqrt{N}$ aux grandes valeurs de N . Ces modes collectifs abaissent sans doute la valeur $\nu = 3$, prédite par la théorie du volume libre, d'une quantité $\Delta\nu$ qui est de l'ordre de $1/\sqrt{N}$.

A cause des temps très longs exigés par les calculs de Monte-Carlo, nous n'avons malheureusement pas pu approfondir de nombreuses questions, que nous allons maintenant mentionner.

Dans le cas du système comprenant N ellipses dures de rapport a/b égal à 6, il serait intéressant de déterminer précisément l'énergie libre dans la région de la transition nématique-liquide, en appliquant notamment un champ magnétique H ; nous pourrions ainsi calculer l'entropie de transition du système. L'étude précise du comportement du paramètre d'ordre angulaire M reste encore à faire, particulièrement pour de suffisamment grandes valeurs de N .

Nous devons encore déceler la transition de désorientation présentée vraisemblablement par des bâtons durs infiniment minces, mais de longueur finie, dans l'espace à deux dimensions.

Il serait enfin très intéressant d'étudier les transitions de phase des systèmes composés d'ellipsoïdes durs de révolution, après avoir résolu les difficultés numériques décrites au paragraphe III-C, afin de

mettre en évidence une différence de comportement, (qui reste encore à préciser), entre les ellipsoïdes allongés suivant leur axe de révolution ($a > b$) et les ellipsoïdes aplatis ($a < b$).

APPENDICE 1

MINIMUM DE LA FONCTION DE CONTACT DES ELLIPSES POUR r FIXE ($r \geq 2 a$).

Dans cet appendice, nous allons prouver l'inégalité (I, 14).

Quand les grands axes des ellipses E_1 et E_2 , introduites au paragraphe I - A, sont parallèles à la ligne des centres $O_1 O_2$, les quantités f_1 et f_2 , définies par les relations (I, 1), prennent la valeur f_d suivante :

$$f_d = 3 - \frac{r^2}{a^2} \quad (A1, 1).$$

Démontrons d'abord l'inégalité :

$$f_1 + f_2 \leq 2 f_d \quad , \quad \text{pour } r \geq 2 a \quad (A1, 2),$$

l'égalité ayant encore lieu si et seulement si les grands axes des ellipses sont parallèles à la ligne des centres $O_1 O_2$.

Posons $x = r^2/a^2$ et définissons les angles $\theta_\alpha = (\vec{r}, \vec{u}_\alpha)$, pour $\alpha = 1$ ou 2 ; si $\theta = \theta_2 - \theta_1 = (\vec{u}_1, \vec{u}_2)$, les relations (I, 1) et (A1, 1) nous donnent l'égalité :

$$f_\alpha - f_d = \left(\frac{a}{b} - \frac{b}{a}\right)^2 \sin^2 \theta - x \left(\frac{a^2}{b^2} - 1\right) \sin^2 \theta_\alpha \quad (A1, 3).$$

Comme x est supérieur ou égal à 4 et $\frac{a^2}{b^2} - 1$ est supérieur à $(\frac{a}{b} - \frac{b}{a})^2$, il suffit de vérifier la relation :

$$\sin^2 \theta \leq 2 (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2) ,$$

l'égalité n'ayant lieu que si $\sin \theta_1 = \sin \theta_2 = 0$.

Pour cette vérification, nous utilisons les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta &= (\sin \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_2 \cos \theta_1)^2 \\ &\leq (|\sin \theta_1| + |\sin \theta_2|)^2 \leq 2 (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2). \end{aligned}$$

Pour $r \geq 2a$, prouvons directement que le polynôme caractéristique $P(\lambda)$ des ellipses, défini par l'égalité (I, 9), admet bien deux racines positives et une racine négative, comme l'indique la Table I (paragraphe I - C). En effet $P(0)$ est positif tandis que $P(1)$ est négatif ou nul, d'après les relations (A1, 2) et (A1, 1).

Les deux racines positives sont confondues (et valent 1) si et seulement si $r = 2a$ et $\theta_1 = \theta_2 = 0$ (modulo π). La fonction de contact Ψ des ellipses est alors nulle, suivant le Lemme 3 (paragraphe I - D). D'après le Lemme 4, Ψ est positive dans les autres cas. Nous excluerons désormais le cas $r = 2a$, dans lequel l'inégalité (I, 14) est évidemment satisfaite puisque la fonction de contact Ψ_d des grands cercles est alors nulle.

Comme les ellipses E_1 et E_2 jouent des rôles symétriques, nous pouvons supposer $f_2 \leq f_1$. Pour $r > 2a$, les relations (A1, 2) et (A1, 1)

nous montrent que f_2 est négatif. Suivant l'égalité (I, 10), la dérivée $P'(\lambda)$ a deux racines réelles μ_1 et μ_2 de signes opposés. Le polynôme $P(\lambda)$ atteint donc un maximum positif quand $\lambda = \mu_1 < 0$ et un minimum négatif lorsque $\lambda = \mu_2 > 0$. De même le polynôme caractéristique des grands cercles possède respectivement un maximum positif et un minimum négatif pour les valeurs $\mu_{1d} < 0$ et $\mu_{2d} > 0$ de λ .

Or, d'après la relation (I, 12) :

$$\Psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b) = -81 P(\mu_1) P(\mu_2)$$

$$\Psi_d\left(\frac{\vec{r}}{a}\right) = -81 P(\mu_{1d}) P(\mu_{2d}).$$

Pour établir l'inégalité (I, 14), nous allons prouver que le maximum (relatif) de $P(\lambda)$ est au moins égal à celui de $P_d(\lambda)$ et que le minimum (relatif) de $P(\lambda)$ est au plus égal à celui de $P_d(\lambda)$.

Comme μ_1 et μ_{1d} sont négatifs, tandis que μ_2 et μ_{2d} sont positifs, il suffit de démontrer les inégalités :

$$P(\mu_{1d}) \geq P_d(\mu_{1d}) \quad (\text{A1, 4 a})$$

$$P(\mu_{2d}) \leq P_d(\mu_{2d}) \quad (\text{A1, 4 b}),$$

la relation (A1, 4 a) étant une identité si et seulement si les grands axes des ellipses sont parallèles à la ligne des centres.

Selon l'égalité (I, 9) :

$$P(\lambda) - P_d(\lambda) = \lambda \left[(f_1 - f_d) \lambda + f_2 - f_d \right] \quad (A1, 5).$$

Compte tenu du choix $f_2 \leq f_1$, l'inégalité (A1, 2) nous montre que le terme $(f_1 - f_d) \lambda + f_2 - f_d$ est négatif ou nul pour $|\lambda| \leq 1$. Or la quantité négative μ_{1d} est supérieure à -1 , car $P_d(-1) = 0$. D'après l'identité (A1, 5), la relation (A1, 4 a) est donc satisfaite. C'est une égalité si et seulement si $f_1 = f_2 = f_d$. Dans ce cas, les grands axes des ellipses sont parallèles à la ligne des centres.

Comme la quantité μ_{2d} est positive, l'inégalité (A1, 4 b) sera vérifiée si l'expression $(f_1 - f_d) \mu_{2d} + f_2 - f_d$ est négative ou nulle. Le cas $f_1 \leq f_d$ est ainsi traité. Supposons donc que f_1 soit supérieur à f_d . μ_{2d} étant la racine positive de $P'_d(\lambda)$, il nous suffit maintenant de prouver que ce polynôme est positif pour $\lambda = (f_d - f_2)/(f_1 - f_d)$. D'après la relation (I, 10), nous allons donc démontrer l'inégalité :

$$\begin{aligned} R(x) &= 3(f_2 - f_d)^2 - 2f_d(f_1 - f_d)(f_2 - f_d) \\ &\quad + f_d(f_1 - f_d)^2 > 0 \end{aligned} \quad (A1, 6).$$

Fixons les angles θ_1 et θ_2 ; nous voulons vérifier que le polynôme $R(x)$ est positif pour $x > 4$. D'après la relation (A1, 1)

$$(3 = f_d + x) :$$

$$R(x) = f_d(f_1 - f_2)^2 + x(f_2 - f_d)^2.$$

Or l'égalité (A1, 3) nous montre que le polynôme $R(x)$ est divisible par x :

$$\frac{R(x)}{x} = R_1(x) = \delta^2 x (3 - x) + (f_2 - f_d)^2 \quad (\text{A1, 7 a}),$$

avec :

$$\delta = \left(\frac{a^2}{b^2} - 1\right) (\sin^2 \theta_2 - \sin^2 \theta_1) \quad (\text{A1, 7 b}).$$

δ est positif, car f_1 est ici supérieur à f_2 .

D'après la relation (A1, 3), $R_1(x)$ est un polynôme de degré au plus égal à deux, dont le coefficient de x^2 est :

$$\left(\frac{a^2}{b^2} - 1\right)^2 \sin^2 \theta_1 (2 \sin^2 \theta_2 - \sin^2 \theta_1).$$

Ce coefficient est positif ou nul. D'autre part $R_1(4)$ est positif ; en effet, suivant l'égalité (A1, 7 a) :

$$R_1(4) = (f_d - f_2 + 2 \delta) (f_d - f_2 - 2 \delta) ;$$

nous vérifions que chaque facteur du produit est positif, en remarquant

que $\delta = \frac{1}{4} (f_1 - f_2)$ pour $x = 4$, d'après les relations (A1, 7 b) et (A1, 3), et en utilisant l'inégalité (A1, 2).

Pour montrer que $R_1(x)$ ou $R(x)$ est positif pour $x > 4$, il suffit donc de prouver que la dérivée $R'_1(4)$ est positive ou nulle, ou de vérifier la relation (quand $x = 4$) :

$$- 5 \delta^2 + 2 (f_d - f_2) \left(\frac{a^2}{b^2} - 1 \right) \sin^2 \theta_2 \geq 0.$$

Or, pour $x \geq 4$, l'identité (A1, 3) nous permet de minorer $f_d - f_2$ par :

$$\left(\frac{a^2}{b^2} - 1 \right) (4 \sin^2 \theta_2 - \sin^2 \theta) .$$

Grâce à l'expression (A1, 7 b) de δ , il est alors suffisant de démontrer l'inégalité :

$$- 5 (\sin^2 \theta_2 - \sin^2 \theta_1)^2 + 8 \sin^4 \theta_2 - 2 \sin^2 \theta \sin^2 \theta_2 \geq 0 ,$$

pour $f_1 > f_2$ ou $|\sin \theta_1| < |\sin \theta_2|$.

Utilisons la majoration suivante de $\sin^2 \theta = \sin^2 (\theta_2 - \theta_1)$:

$$\sin^2 \theta \leq \sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 + 2 |\sin \theta_1| |\sin \theta_2| .$$

Posons : $\tau_1 = |\sin \theta_1|$ et : $\tau_2 = |\sin \theta_2|$; notre démonstration est terminée car l'inégalité suivante est satisfaite, pour $0 \leq \tau_1 < \tau_2$:

$$\tau_2^4 - 5 \tau_1^4 + 8 \tau_1^2 \tau_2^2 - 4 \tau_1 \tau_2^3 \geq 0 ;$$

en effet ce polynôme, divisible par $\tau_2 - \tau_1$, s'écrit :

$$(\tau_2 - \tau_1) \left[(\tau_2 - \tau_1)^3 + 2 \tau_1^2 \tau_2 + 6 \tau_1^3 \right] .$$

APPENDICE 2

DETERMINATION DE LA FONCTION DE CONTACT DES ELLIPSOÏDES.

Dans cet appendice, nous trouvons la condition nécessaire et suffisante pour que les ellipsoïdes de révolution E_1 et E_2 , introduits au paragraphe I - G, ne se coupent pas. Nous prouvons les Lemmes 7, 8 et 9 énoncés dans ce paragraphe. Pour démontrer le Lemme 7, nous allons suivre exactement la même démarche que celle décrite au chapitre I, dans le cas des ellipses.

A - LE POLYNOME CARACTERISTIQUE

Dans un système d'axes Oxyz, les équations des ellipsoïdes E_1 et E_2 s'écrivent respectivement : $F_1(M) = 0$ et : $F_2(M) = 0$, M étant le point courant. Considérons le faisceau de quadriques $\Gamma(\lambda)$ [8] d'équation :

$$F(M; \lambda) = F_1(M) + \lambda F_2(M) = 0 \quad (A2, 1),$$

où λ est un paramètre complexe.

Toutes les quadriques $\Gamma(\lambda)$ du faisceau passent par les points communs à E_1 et E_2 , réels ou imaginaires. Nous allons chercher les quatre quadriques dégénérées du faisceau, Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 et Γ_4 ; (une quadrique dégénérée est un "cône" du second ordre au sens large, dont un sommet peut se trouver à l'infini). Nous voulons donc déterminer le polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$, du quatrième degré, dont les racines λ_1 , λ_2 , λ_3 et λ_4 correspondent à ces cônes.

Soient O le milieu du segment $O_1 O_2$ et Oz l'axe perpendiculaire au plan $(\vec{u}_1, \vec{u}_2)$; Oz définit une direction principale commune aux deux ellipsoïdes. Nous désignons par $\vec{j}$ la projection de $\vec{OO}_2$ sur le plan $(\vec{u}_1, \vec{u}_2)$ et par $\vec{i}$ sa projection sur Oz :

$$\vec{O_1 O} = \vec{O O_2} = \vec{j} + \vec{i} \quad (A2, 2).$$

$\vec{i}$ est le vecteur se déduisant de $\vec{j}$ dans la rotation d'angle $\pi/2$ autour de l'axe Oz .

Nous choisissons comme origine O et comme vecteurs de base (orthogonaux) $\vec{j}$, $\vec{i}$ et $\vec{k}$. Soient x , y et z les coordonnées du point courant M :

$$\vec{OM} = x \vec{j} + y \vec{i} + z \vec{k} \quad (A2, 3).$$

Les relations (I, 5), (I, 8) et (I, 1 c) définissent toujours (pour $\alpha = 1$ ou 2) les quantités K , A_α , B_α , C_α , D_α et G . En outre nous posons :

$$I = \vec{i}^2 \quad (A2, 4 a)$$

$$J_{\alpha} = A_{\alpha} + I - b^2 \quad (\text{A2, 4 b}).$$

L'équation de l'ellipsoïde E_{α} ($\alpha = 1$ ou 2) s'écrit : $F_{\alpha}(M) = 0$, cette fonction étant encore fournie par l'égalité (I, 6 a). Donc, en utilisant les relations (A2, 3) et (A2, 2), nous obtenons l'expression suivante :

$$\begin{aligned} F_{\alpha}(M) = & A_{\alpha} x^2 + 2 B_{\alpha} xy + C_{\alpha} y^2 + I z^2 \\ & + (-1)^{\alpha+1} 2 (A_{\alpha} x + B_{\alpha} y + I z) + J_{\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2, 5}).$$

Pour trouver les cônes du faisceau, nous allons annuler le déterminant $\Delta_4(\lambda)$ de la quadrique $\Gamma(\lambda)$, dont l'équation est donnée par l'égalité (A2, 1) :

$$\Delta_4(\lambda) = \begin{vmatrix} A_1 + \lambda A_2 & B_1 + \lambda B_2 & 0 & A_1 - \lambda A_2 \\ B_1 + \lambda B_2 & C_1 + \lambda C_2 & 0 & B_1 - \lambda B_2 \\ 0 & 0 & (1 + \lambda) I & (1 - \lambda) I \\ A_1 - \lambda A_2 & B_1 - \lambda B_2 & (1 - \lambda) I & J_1 + \lambda J_2 \end{vmatrix} \quad (\text{A2, 6}).$$

En développant ce déterminant, puis en le divisant par $-b^2 I \cdot D_1 = -b^2 I \cdot D_2$, nous obtenons le polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$, dont les racines $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ et λ_4 correspondent aux cônes du faisceau, $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ et Γ_4 :

$$P_4(\lambda) = \lambda^4 + g_1 \lambda^3 + h \lambda^2 + g_2 \lambda + 1 \quad (\text{A2, 7}),$$

avec (si $\alpha = 1$ ou 2) :

$$g_\alpha = 2 + G - 4 \frac{I + A_\alpha}{b^2} \quad (\text{A2, 8 a})$$

$$h = 2 (G + 1) - 4 \frac{G I + A_1 + A_2}{b^2} \quad (\text{A2, 8 b}).$$

Les coefficients g_α et h sont aussi définis par les égalités
(I, 15).

- UNE PROPRIÉTÉ DU POLYNÔME CARACTÉRISTIQUE

Nous voulons démontrer ici la proposition suivante, équivalente
au Lemme 7, énoncé au paragraphe I - G :

Lemme 10 -

Pour que les ellipsoïdes de révolution E_1 et E_2 n'aient aucun
point réel commun ou soient tangents extérieurement, il faut et il suffit
que leur polynôme caractéristique ait ses racines réelles, non forcément
distinctes, et que celles-ci ne soient pas toutes négatives.

Un simple examen de la Table I, figurant au paragraphe I - C,
nous montre que ce dernier lemme reste valable quand on remplace les
ellipsoïdes E_1 et E_2 par deux ellipses égales.

Supposons donc que les ellipsoïdes E_1 et E_2 ne se rencontrent pas ou soient tangents extérieurement. Si leur polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$ admettait au moins deux racines imaginaires conjuguées λ_1 et $\bar{\lambda}_1$, les cônes du faisceau correspondants, $\Gamma(\lambda_1)$ et $\Gamma(\bar{\lambda}_1)$, étant imaginaires conjugués d'après l'équation (A2, 1), se rencontreraient au moins en deux points réels distincts M_0 et M'_0 ; (pour le prouver, il suffit de faire passer des plans réels par les sommets imaginaires conjugués de ces cônes). Les ellipsoïdes E_1 et E_2 , contenant M_0 et M'_0 , auraient alors plusieurs points réels communs. Les racines de $P_4(\lambda)$ sont donc réelles.

Pour prouver qu'elles ne sont pas toutes négatives, il suffit de répéter, avec quelques très légères modifications, la démonstration correspondante déjà faite à la fin du paragraphe I - E - 2, dans le cas de deux ellipses sans aucun point commun ; en particulier, pour étudier le signe des racines du polynôme $P_4(\lambda)$, défini par l'égalité (A2, 7), nous utilisons la proposition suivante, analogue au Lemme 5 (paragraphe I - D) :

Lemme 11 -

Quand le polynôme $P_4(\lambda)$ a ses racines réelles, elles sont toutes négatives si et seulement si les coefficients g_1 , g_2 et h sont positifs (ou nuls).

Pour achever la démonstration du Lemme 10, supposons maintenant que les ellipsoïdes E_1 et E_2 se coupent au moins en deux points réels

distincts M_1 et M_2 ; nous allons prouver que toute racine réelle éventuelle λ_1 de $P_4(\lambda)$ est négative.

Comme chaque quadrique $\Gamma(\lambda)$ du faisceau, définie par l'équation (A2, 1), contient les points M_1 et M_2 , le cône $\Gamma(\lambda_1)$ possède au moins une génératrice réelle. Sur cette génératrice, plaçons-nous en un point M_0 extérieur aux deux ellipsoïdes E_1 et E_2 . L'égalité (I, 6 a), valable aussi pour les ellipsoïdes, nous montre que les quantités $F_1(M_0)$ et $F_2(M_0)$ sont positives. Or M_0 appartient à $\Gamma(\lambda_1)$; l'équation (A2, 1) nous donne la relation :

$$F_1(M_0) + \lambda_1 F_2(M_0) = 0 \quad (\text{A2, 9}).$$

λ_1 est donc négatif.

C - EQUIVALENCE DES LEMMES 7 ET 10

Du Lemme 10, que nous venons de prouver, nous allons déduire le Lemme 7, énoncé au paragraphe I - G, directement applicable au calcul de Monte-Carlo. Compte tenu du Lemme 11, il suffit donc de trouver quelles conditions doivent vérifier les coefficients g_1 , g_2 et h du polynôme $P_4(\lambda)$, pour que celui-ci ait ses racines, λ_1 , λ_2 , λ_3 et λ_4 , réelles.

Introduisons les quantités σ_1 , σ_2 et σ_3 suivantes :

$$\sigma_1 = \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_3 \lambda_4 \quad (\text{A2, 10 a})$$

$$\sigma_2 = \lambda_1 \lambda_3 + \lambda_2 \lambda_4 \quad (\text{A2, 10 b})$$

$$\sigma_3 = \lambda_1 \lambda_4 + \lambda_2 \lambda_3 \quad (\text{A2, 10 c}).$$

σ_1 , σ_2 et σ_3 sont les racines du polynôme $Q_3(\sigma)$ suivant, que nous déterminons en calculant les fonctions symétriques élémentaires de σ_1 , σ_2 et σ_3 au moyen de l'égalité (A2, 7) :

$$Q_3(\sigma) = \sigma^3 + p \sigma^2 + q \sigma + w \quad (\text{A2, 11}),$$

les coefficients p , q et w étant définis par les relations (I, 16).

Nous allons maintenant prouver la proposition suivante :

Lemme 12 -

Pour que le polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$ ait ses racines réelles, il faut et il suffit que celles de $Q_3(\sigma)$ soient réelles et supérieures ou égales à 2 en valeur absolue.

Cette condition est nécessaire : si λ_1 , λ_2 , λ_3 et λ_4 sont réels, σ_1 , par exemple, est la somme des quantités réelles $\lambda_1 \lambda_2$ et $\lambda_3 \lambda_4$, dont le produit vaut 1 d'après l'égalité (A2, 7) ; le module de σ_1 est donc au minimum égal à 2.

Réciproquement, si σ_1 , σ_2 et σ_3 sont réels et au moins égaux à 2 en valeur absolue, le produit de deux racines quelconques λ_j et λ_k d'indices j et k différents est réel, suivant les relations (A2, 10). Donc, si l'une des racines λ_1 , λ_2 , λ_3 et λ_4 est réelle, elles le sont toutes.

Supposons alors que le polynôme $P_4(\lambda)$ admette deux couples de racines imaginaires conjuguées (λ_1, λ_1^-) et (λ_2, λ_2^-) . Le produit $(\lambda_1 \lambda_2) (\lambda_1 \lambda_2^-) = \lambda_1^2 |\lambda_2|^2$ est réel. λ_1 est donc imaginaire pur, ainsi que λ_2 . En formant les fonctions symétriques élémentaires des racines du polynôme $P_4(\lambda)$, défini par l'égalité (A2, 7), nous obtenons les relations :

$$g_1 = g_2 = 0 \quad \text{et} \quad h = |\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2,$$

incompatibles avec l'identité (I, 15 b).

Les racines du polynôme $P_4(\lambda)$ sont donc réelles et le Lemme 12 est démontré.

Pour terminer la preuve du Lemme 7, énoncé au paragraphe I - G, il est donc suffisant de démontrer la proposition suivante, qui fait intervenir les quantités Φ , S_1 et S_2 , définies par les égalités (I, 17) :

Lemme 13 -

Pour que le polynôme $Q_3(\sigma)$ ait ses racines réelles, il faut et il suffit que la fonction de contact Φ soit positive ou nulle ; de plus, ces racines réelles ont un module au moins égal à 2 si et seulement si les quantités S_1 et S_2 sont également positives ou nulles.

La première partie de cette proposition est analogue au Lemme 4, énoncé au paragraphe I - D : les fonctions de contact Φ et Ψ sont respectivement les discriminants des polynômes du troisième degré $Q_3(\sigma)$ et $P(\lambda)$.

Prouvons maintenant la seconde partie du Lemme 13. Nous supposons que les racines σ_j ($j = 1, 2, 3$) du polynôme $Q_3(\sigma)$ sont réelles et nous considérons les trois nombres réels t_j suivants :

$$t_j = \sigma_j^2 - 4 \quad (\text{A2, 12}).$$

Formons les trois fonctions symétriques élémentaires des quantités t_j :

$$S_1 = t_1 + t_2 + t_3 \quad (\text{A2, 13 a})$$

$$S_2 = t_1 t_2 + t_1 t_3 + t_2 t_3 \quad (\text{A2, 13 b})$$

$$S_3 = t_1 t_2 t_3 \quad (\text{A2, 13 c}).$$

Nous démontrons facilement la proposition suivante, semblable au Lemme 5, énoncé au paragraphe I - D :

pour que les nombres réels t_1 , t_2 et t_3 soient positifs ou nuls, il faut et il suffit que les quantités S_1 , S_2 et S_3 soient également positives ou nulles.

Or le terme S_3 n'est jamais négatif, car, suivant les égalités (A2, 13 c), (A2, 12), (A2, 11) et (I, 16) :

$$S_3 = \prod_j (\sigma_j^2 - 4) = \prod_j (\sigma_j - 2) \cdot \prod_k (\sigma_k + 2) \quad (\text{A2, 14 a})$$

$$S_3 = Q_3(2) \cdot Q_3(-2) = (g_1 - g_2)^2 (g_1 + g_2)^2 \quad (\text{A2, 14 b}).$$

Pour finir la démonstration du Lemme 13, vérifions donc que les expressions S_1 et S_2 , définies par les égalités (A2, 13) et (A2, 12), satisfont aux identités (I, 17 b) et (I, 17 c). Pour calculer S_1 et S_2 , nous utilisons les fonctions symétriques élémentaires des racines σ_1 , σ_2 et σ_3 , fournies par la relation (A2, 11) ; d'où :

$$S_1 = p^2 - 2q - 12 \quad (\text{A2, 15 a})$$

$$S_2 = q^2 - 2wp - 8(p^2 - 2q) + 48 \quad (\text{A2, 15 b}).$$

Suivant les égalités (I, 16), S_1 et S_2 vérifient bien les identités (I, 17 b) et (I, 17 c).

Les Lemmes 7 et 10 sont donc équivalents.

D - PARTICULARITE DE LA FONCTION DE CONTACT Φ

Nous voulons prouver ici le Lemme 8 et surtout le Lemme 9, énoncés au paragraphe I - G. Avant de démontrer ces lemmes, nous allons établir la proposition qui suit :

Lemme 14 -

Les trois propriétés suivantes sont équivalentes :

- le polynôme $P_4(\lambda)$ possède au moins une racine multiple ;
- $Q_3(\sigma)$ a une racine multiple ;
- la fonction de contact Φ est nulle.

Prouvons d'abord l'équivalence des deux premières propriétés ; quand deux racines λ_1 et λ_2 de $P_4(\lambda)$ sont identiques, $\sigma_2 = \sigma_3$ d'après les relations (A2, 10). $Q_3(\sigma)$ admet donc une racine multiple. Réciproquement, si deux racines σ_1 et σ_2 de $Q_3(\sigma)$ sont confondues, $P_4(\lambda)$ possède au moins une racine multiple, λ_1 ou λ_2 , car :

$$\sigma_1 - \sigma_2 = (\lambda_1 - \lambda_4) (\lambda_2 - \lambda_3) .$$

D'autre part, dans la démonstration du Lemme 13, énoncé au paragraphe précédent, nous avons vu que Φ est le discriminant du polynôme $Q_3(\sigma)$. Les deux dernières propriétés considérées dans le Lemme 14 sont donc équivalentes.

Grâce au Lemme 14, pour prouver le Lemme 8 (paragraphe I - G), il suffit donc de démontrer la proposition suivante , analogue au Lemme 6, énoncé au paragraphe I - E - 1 dans le cas des ellipses :

Lemme 15 -

Quand les ellipsoïdes E_1 et E_2 sont tangents en un point réel M_0 , leur polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$ possède au moins une racine multiple réelle λ_0 , telle que le cône $\Gamma(\lambda_0)$ correspondant du faisceau ait comme sommet M_0 .

Prenons en effet un système d'axes rectangulaires M_0xyz , d'origine M_0 et tel que M_0xy soit le plan tangent commun aux deux ellipsoïdes, en M_0 . Si x , y et z sont les coordonnées du point courant M ,

les équations des ellipsoïdes E_1 et E_2 s'écrivent respectivement :

$$F_1(M) = 0 \quad \text{et} \quad F_2(M) = 0, \quad \text{avec} :$$

$$F_1(M) = \phi_1(x, y, z) + 2 H_1 z \quad (\text{A2, 16 a})$$

$$F_2(M) = \phi_2(x, y, z) + 2 H_2 z \quad (\text{A2, 16 b}),$$

les fonctions ϕ_1 et ϕ_2 étant des formes quadratiques de x , y et z ;

(H_1 et H_2 sont des constantes).

Soit $\Gamma(\lambda_0)$ le cône défini par l'équation suivante :

$$F(M; \lambda_0) = F_1(M) + \lambda_0 F_2(M) = 0 \quad (\text{A2, 17 a}),$$

où :

$$\lambda_0 = -H_1/H_2 \quad (\text{A2, 17 b}).$$

$\Gamma(\lambda_0)$ est bien un cône de sommet M_0 appartenant au faisceau de quadriques défini par l'équation (A2, 1). Pour démontrer le Lemme 15, nous devons donc encore vérifier que le nombre réel λ_0 est une racine multiple du polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$.

Considérons le faisceau de quadriques dont l'équation s'écrit :

$$F(M; \lambda_0) + \mu F_2(M) = 0 \quad (\text{A2, 18 a}),$$

où μ est un paramètre complexe. Les faisceaux définis par les équations (A2, 1) et (A2, 18 a) sont équivalents, comme le montre la correspondance suivante entre les paramètres λ et μ :

$$\lambda = \lambda_0 + \mu \quad (\text{A2, 18 b}).$$

Comme nous l'avons fait au paragraphe A, nous calculons directement le déterminant $\Delta_4(\lambda) = \Delta_4(\lambda_0 + \mu)$ de la quadrique $\Gamma(\lambda)$ définie par l'équation (A2, 18 a), en nous rappelant que $F(M; \lambda_0)$ est une forme quadratique des coordonnées x, y et z de M . Nous vérifions que $\mu = 0$ est bien une racine multiple du polynôme $\Delta_4(\lambda_0 + \mu)$, de degré quatre. λ_0 est donc une racine multiple du polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$, défini par l'égalité (A2, 7), qui est proportionnel au déterminant $\Delta_4(\lambda)$, satisfaisant à l'identité (A2, 6).

Après avoir prouvé le Lemme 8, nous allons maintenant démontrer le Lemme 9, énoncé également au paragraphe I - G. Nous supposons donc que les ellipsoïdes E_1 et E_2 n'ont aucun point (réel) commun et que leur fonction de contact Φ est nulle. D'après le Lemme 10, énoncé au paragraphe B, les racines $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ et λ_4 du polynôme $P_4(\lambda)$ sont réelles et l'une d'elles au minimum est positive. Suivant le Lemme 14, qui vient d'être prouvé, $P_4(\lambda)$ possède au moins une racine multiple : $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_0$.

A la fin de ce paragraphe, nous démontrerons que λ_0 est négatif. Dans ce cas, les racines λ_3 et λ_4 sont positives, car $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 = 1$, d'après l'égalité (A2, 7). Or, selon les relations (A2, 7) et (I, 15 b), $P_4(\lambda) \rightarrow +\infty$ quand $\lambda \rightarrow -\infty$, $P_4(-1) = 2 + h - g_1 - g_2$ est négatif ou nul, $P_4(0) = 1$; nous en déduisons que la racine double négative λ_0 vaut -1 .

En écrivant que $P_4(\lambda)$ et sa dérivée sont nuls quand $\lambda = -1$, et en utilisant les relations (A2, 7) et (I, 15), nous obtenons successivement les égalités :

$$(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{r}) = 0, \quad g_1 = g_2 \quad \text{et} : |\vec{r} \cdot \vec{u}_1| = |\vec{r} \cdot \vec{u}_2|.$$

Pour finir la démonstration du Lemme 9, énoncé au paragraphe I - G, nous devons encore prouver que la racine multiple λ_0 de $P_4(\lambda)$ est nécessairement négative, quand les ellipsoïdes E_1 et E_2 n'ont aucun point commun.

Supposons donc que λ_0 soit positif. Nous remarquons d'abord que le cône $\Gamma(\lambda_0)$, défini par l'équation (A2, 1), où $\lambda = \lambda_0$, contient un seul point réel : son sommet M_0 . En effet, soit M un point réel de ce cône :

$$F_1(M) + \lambda_0 F_2(M) = 0 \quad (\text{A2, 19}).$$

Comme λ_0 est positif, l'une au moins des quantités $F_1(M)$ et $F_2(M)$ est négative ou nulle. Suivant l'égalité (I, 6 a), le point M n'est donc pas simultanément extérieur aux ellipsoïdes E_1 et E_2 ; le cône $\Gamma(\lambda_0)$ n'admet alors aucune génératrice réelle. Son sommet M_0 est unique, réel, et ne se trouve pas à l'infini.

Dans un système d'axes M_0xyz , le cône $\Gamma(\lambda_0)$ est encore défini par l'équation (A2, 17 a), où $F(M; \lambda_0)$ est une forme quadratique des coordonnées x , y et z de M . L'équation de l'ellipsoïde E_2 s'écrit : $F_2(M) = 0$; ici nous utilisons la représentation suivante du polynôme $F_2(M)$:

$$F_2(M) = \phi_2(x, y, z) + \ell_2(x, y, z) + \delta \quad (\text{A2, 20 a}),$$

où la forme quadratique ϕ_2 , la forme linéaire ℓ_2 et la constante δ sont invariantes dans toute rotation des axes M_0xyz autour de M_0 . Si nous choisissons les axes M_0x et M_0y dans le plan défini par l'équation : $\ell_2 = 0$, cette forme linéaire s'écrit :

$$\ell_2(x, y, z) = 2 \gamma z \quad (\text{A2, 20 b}),$$

γ étant une constante.

Calculons directement le déterminant $\Delta_4(\lambda) = \Delta_4(\lambda_0 + \mu)$ de la quadrique $\Gamma(\lambda)$ du faisceau, définie par les équations (A2, 18), en nous rappelant que $F(M; \lambda_0)$ est une forme quadratique de x, y et z , et en utilisant la représentation (A2, 20) de $F_2(M)$.

Nous obtenons la relation :

$$\Delta_4(\lambda_0 + \mu) = (\Delta \cdot \delta) \mu + \mu^2 \Pi_2(\mu) \quad (\text{A2, 21}),$$

où Δ est le déterminant de la forme quadratique $F(M; \lambda_0)$ et $\Pi_2(\mu)$ est un polynôme du second degré.

Par hypothèse, λ_0 est une racine multiple du polynôme caractéristique $P_4(\lambda)$, proportionnel à $\Delta_4(\lambda)$; $\mu = 0$ est donc une racine multiple du polynôme $\Delta_4(\lambda_0 + \mu) = \Delta_4(\lambda)$ et, suivant l'identité (A2, 21), $\Delta \cdot \delta = 0$. Or le déterminant Δ de la forme quadratique $F(M; \lambda_0)$ n'est pas nul, car le sommet M_0 du cône $\Gamma(\lambda_0)$ est unique : $\delta = 0$.

Selon la représentation (A2, 20 a) de $F_2(M)$, toute quadrique $\Gamma(\lambda)$ du faisceau, définie par les équations (A2, 18), est tangente en M_0 au plan $\ell_2(x, y, z) = 0$. Comme les ellipsoïdes E_1 et E_2 n'ont aucun point commun, la racine multiple λ_0 de $P_4(\lambda)$ ne peut donc pas être positive.

APPENDICE 3

VALEURS DE Ψ QUAND LES GRANDS AXES DES ELLIPSES SONT PARALLELES

Utilisons les notations du paragraphe I-A. Quand les grands axes des ellipses E_1 et E_2 sont parallèles : $\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_0$ et $\vec{u}'_1 = \vec{u}'_2 = \vec{u}'_0$. Dans ce cas, nous désignons par x et y les coordonnées du vecteur $\vec{r} = 0_1 \vec{0}_2$ dans la base orthonormée $(\vec{u}_0, \vec{u}'_0)$. Posons :

$$s = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \quad (\text{A3, 1 a}).$$

D'après les relations (I, 1), les fonctions f_1 , f_2 et Ψ s'écrivent ainsi :

$$f_1(\vec{r}, \vec{u}_0, \vec{u}'_0) = f_2(\vec{r}, \vec{u}_0, \vec{u}'_0) = 3 - s = f \quad (\text{A3, 1 b})$$

$$\Psi(\vec{r}, \vec{u}_0, \vec{u}'_0) = 3(f - 3)^3(f + 1) = 3s^3(s - 4) \quad (\text{A3, 1 c}).$$

En particulier, quand E_1 et E_2 sont deux ellipses adjacentes du réseau représenté dans la Figure 2, la fonction de contact Ψ est nulle ; les quantités s et f prennent les valeurs suivantes :

$$s = s^{(0)} = 4 \quad (\text{A3, 2 a})$$

$$f = f^{(0)} = -1 \quad (\text{A3, 2 b}).$$

Aux sites de ce réseau (Figure 2), occupés par les centres des ellipses, appliquons l'homothétie de centre 0 et de rapport $\left(\frac{A}{A_0}\right)^{\frac{1}{2}}$, en maintenant fixes les directions des axes de ces ellipses ainsi que leurs dimensions a et b. Dans le cas de deux ellipses plus proches voisines, la fonction s devient égale à $4 \frac{A}{A_0}$, selon les relations (A3, 1 a) et (A3, 2 a). La fonction de contact Ψ relative à deux ellipses adjacentes prend donc la valeur Ψ_L suivante :

$$\Psi_L \left(\frac{A}{A_0}\right) = 3 \cdot 2^8 \left(\frac{A}{A_0}\right)^3 \left(\frac{A}{A_0} - 1\right) \quad (\text{A3, 3}).$$

APPENDICE 4

LE SIGNE DE $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Psi$ DANS LE CAS DU CONTACT EXTERIEUR

Supposons que les ellipses E_1 et E_2 , introduites au paragraphe I-A, soient tangentes extérieurement. Leur fonction de contact $\Psi(\vec{r}, \vec{u}_1, \vec{u}_2; a, b)$, définie par les égalités (I, 1), est nulle, suivant le Lemme 1, énoncé dans ce paragraphe. Faisons croître la distance r des centres O_1 et O_2 de ces ellipses, en fixant les directions de leurs grands axes et de la droite $O_1 O_2$. La fonction Ψ devient positive, selon le Lemme 2, énoncé également au paragraphe I-A. Dans le cas du contact extérieur, la dérivée partielle $\frac{\partial \Psi}{\partial r}$ est donc positive ou nulle, ainsi que $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Psi$; (nous prenons ici le gradient de Ψ par rapport à $\vec{r}$). Nous voulons prouver que la quantité $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Psi$ n'est alors jamais nulle.

Supposons donc maintenant que les ellipses E_1 et E_2 n'aient aucun point commun ou soient tangentes extérieurement. Permutons au besoin E_1 et E_2 de façon que f_2 soit inférieur ou égal à f_1 ; f_2 est donc négatif suivant le Lemme 2. Les racines μ_1 et μ_2 du polynôme $P'(\lambda)$, défini par l'égalité (I, 10), sont alors réelles et vérifient la condition : $\mu_1 < 0 < \mu_2$. De plus μ_1 et μ_2 sont des fonctions continuellement différentiables des coefficients f_1 et f_2 , donc de $\vec{r}$; (nous fixons $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ ici).

Comme μ_1 et μ_2 annulent la dérivée du polynôme caractéristique $P(\lambda)$, défini par la relation (I, 9), l'identité (I, 12) nous donne la représentation suivante du gradient de la fonction de contact Ψ (par rapport à $\vec{r}$) :

$$-\frac{1}{81} \vec{\nabla} \Psi = P(\mu_1) (\mu_2^2 \vec{\nabla} f_1 + \mu_2 \vec{\nabla} f_2) + P(\mu_2) (\mu_1^2 \vec{\nabla} f_1 + \mu_1 \vec{\nabla} f_2) \quad (A4, 1).$$

D'après la Table I (figurant au paragraphe I-C), $P(\lambda)$ admet une racine double positive dans le cas du contact extérieur. $P(\mu_2)$ est donc nul, tandis que le maximum (relatif) $P(\mu_1)$ de $P(\lambda)$ est positif. D'autre part les fonctions $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} f_\alpha$ ($\alpha = 1$ ou 2) sont partout négatives (pour $r \neq 0$), selon les égalités (I, 1). L'identité (A4, 1) nous montre donc que la quantité $\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \Psi$ est toujours positive, dans le cas du contact extérieur.

Lorsque les ellipses E_1 et E_2 sont tangentes, le gradient de Ψ , au point de contact, est d'ailleurs parallèle à la normale commune. En utilisant directement les relations (I, 1), nous pouvons démontrer que le gradient de Ψ ne s'annule jamais quand les ellipses E_1 et E_2 ne se coupent pas.

R E F E R E N C E S

- [1] I.G. CHISTYAKOV, Soviet Physics Uspekhi 9 (1967) 551.
- [2] L. ONSAGER, Phys. Rev. 62 (1942) 558 et Ann. N.Y. Acad. Sci. 51 (1949) 627.
- [3] R. ZWANZIG, J. Chem. Phys. 39 (1963) 1714.
- [4] W.W. WOOD et F.R. PARKER, J. Chem. Phys. 27 (1957) 720.
- [5] B.J. ALDER et T.E. WAINWRIGHT, Phys. Rev. 127 (1962) 359.
- [6] L.D. LANDAU et E.M. LIFSHITZ, Statistical Physics, p. 409 à 412, Pergamon Press, London - Paris (1959).
- [7] G. CAGNAC, E. RAMIS et J. COMMEAU, Nouveau Cours de Mathématiques Spéciales, Vol. 3 p. 481, Masson et Cie, Paris (1965).
- [8] H. COMMISSAIRE et G. CAGNAC, Cours de Mathématiques Spéciales, Vol. 3 p. 451, Masson et Cie, Paris (1942).

- [9] Z.W. SALSBERG et W.W. WOOD, J. Chem. Phys. 37 (1962) 798.
- [10] K. HUANG, Statistical Mechanics, p. 150, J. Wiley and Sons, New-York. London. Sydney (1965).
- [11] Handbook of Statistical Tables, D.B. OWEN, p. 41, Addison-Wesley Publishing Company (1962).
- [12] Physics and Chemistry of Organic Solid State, D. FOX, M.M. LABES et A. WEISSBERGER, Vol. 1 p. 89, Interscience Publishers, New-York. London (1963-1965).
- [13] Plastic Crystals and Rotation in the Solid-State, (Compte rendu d'un symposium ayant eu lieu à l'Université d'Oxford en Avril 1960), J. of Phys. and Chem. of Solids 18 (1961) p. 1 à 92.
- [14] A. ISIHARA, J. Chem. Phys. 19 (1951) 1142.

Légendes des Figures

- Figure 1 : le réseau hexagonal des disques durs.
- Figure 2 : un état d'empilement maximum du système d'ellipses dures.
- Figure 3 : passage de l'état solide à l'état nématique, à l'aire $A/A_0 = 1,15$; n_s est le nombre total de pas du calcul de Monte-Carlo.
- Figure 4 : les branches solide et nématique de l'isotherme (pour $A/A_0 < 1,30$) ; nous avons aussi représenté le passage de l'état solide à l'état nématique, observé à l'aire $A/A_0 = 1,15$.
- Figure 5 : les isothermes à moyenne densité ($1,4 \leq A/A_0 \leq 2,0$), en champ magnétique H nul et pour $\beta H^2 = 4$ (courbe inférieure) ; la région de la transition nématique-liquide, (pour H nul), est représentée à une plus grande échelle.

Figure 6 : variation du paramètre d'ordre angulaire M en fonction de A/A_0 , en champ magnétique H nul (cercles noirs) et pour $\beta H^2 = 4$ (points avec barres d'erreur).

FIG. 1

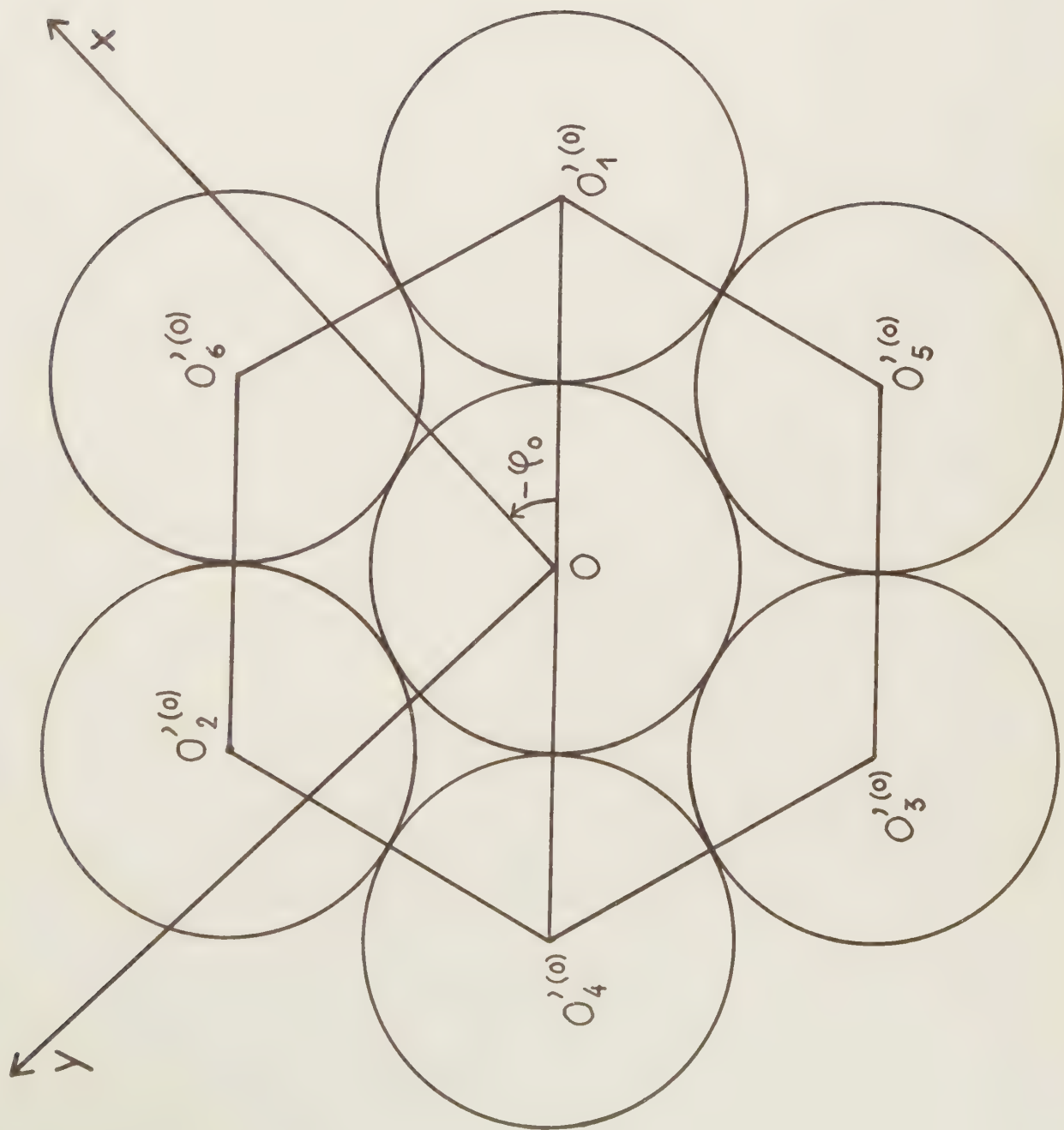


FIG. 2

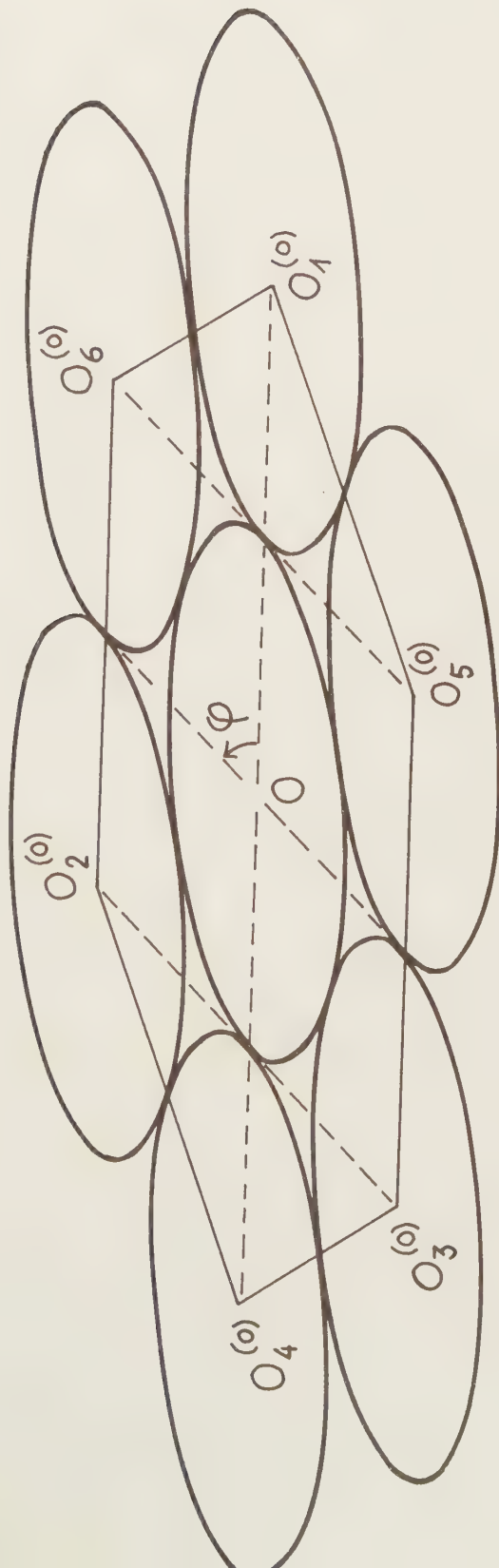


FIG. 3

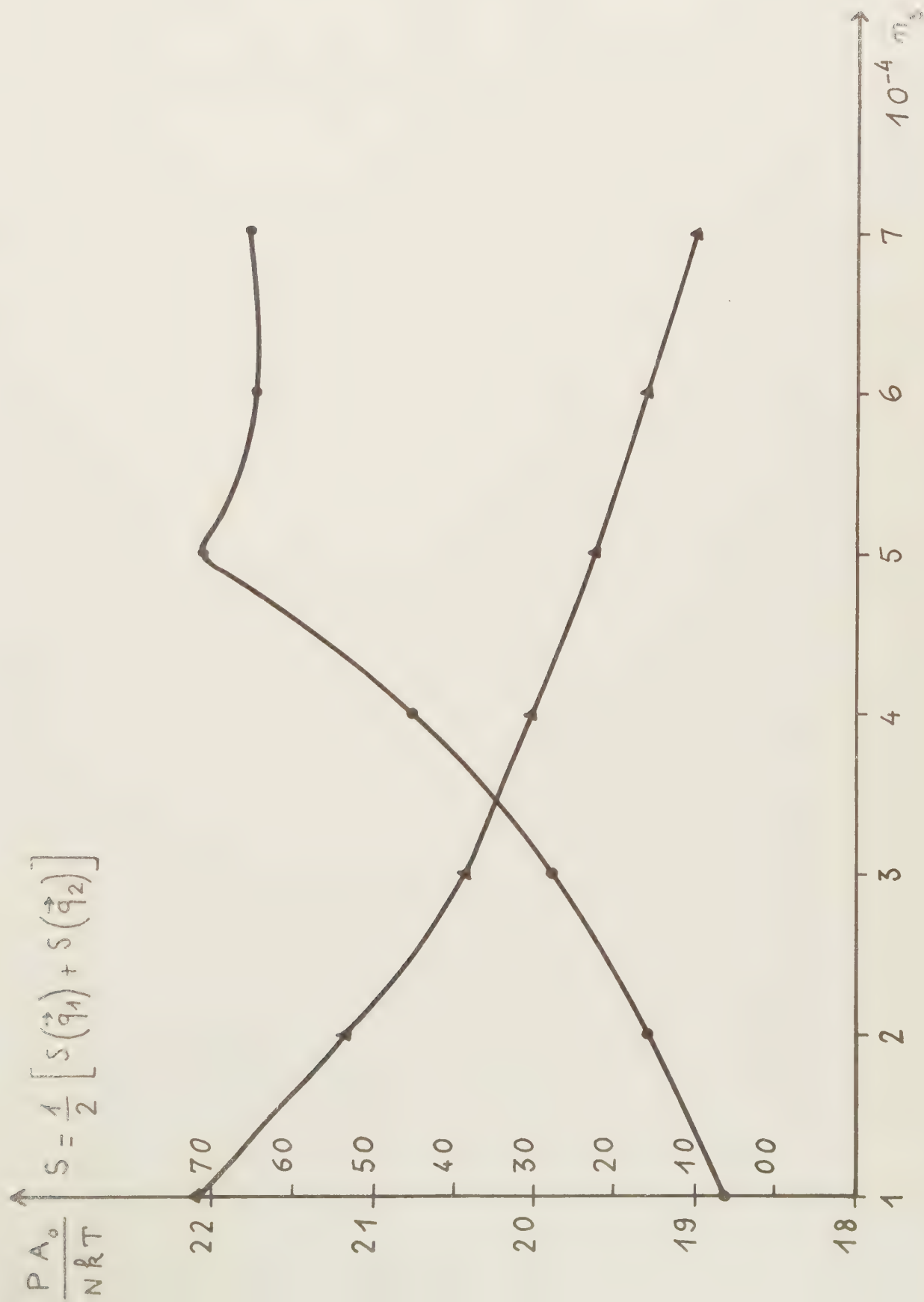


FIG. 4

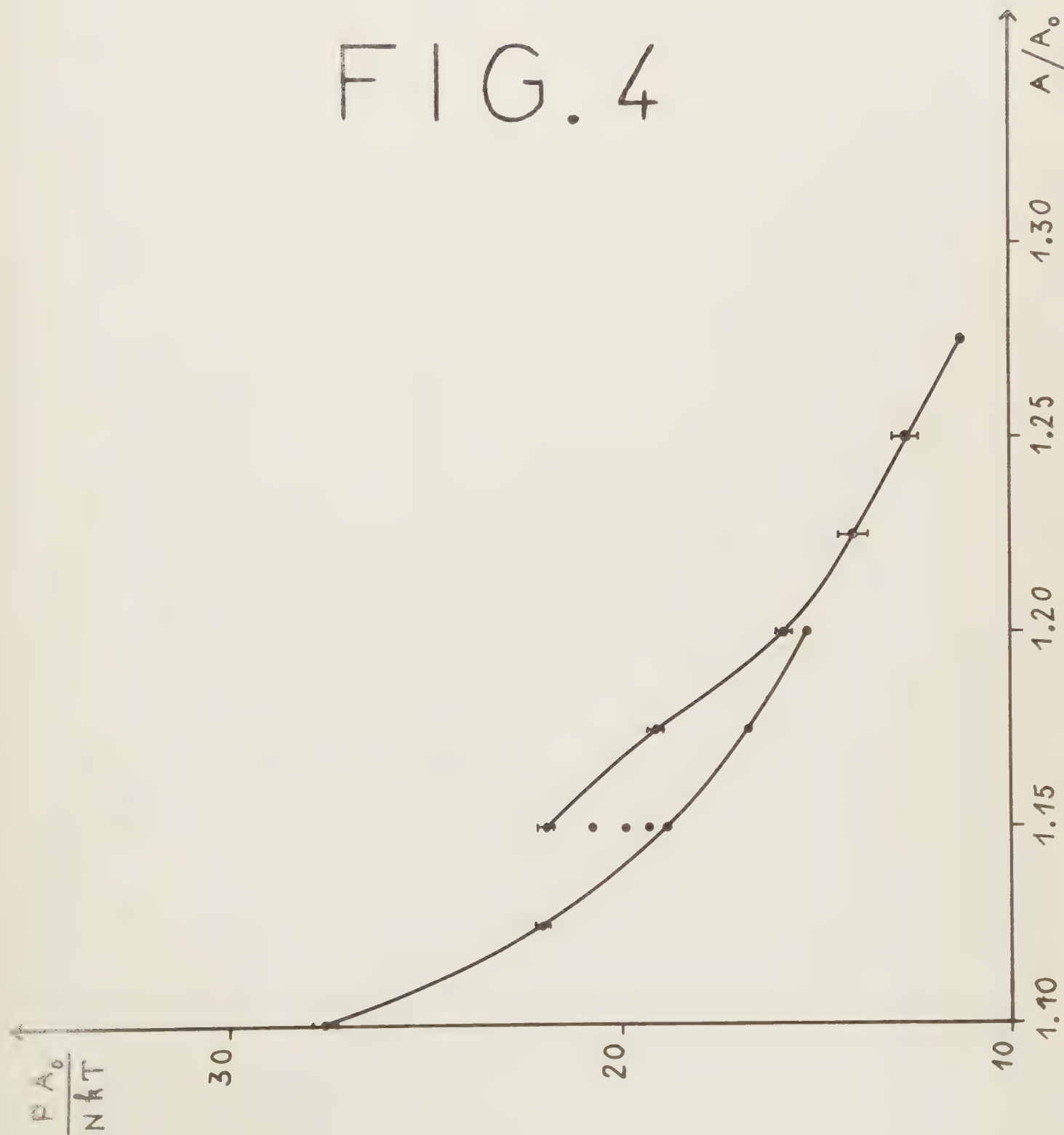


FIG. 5

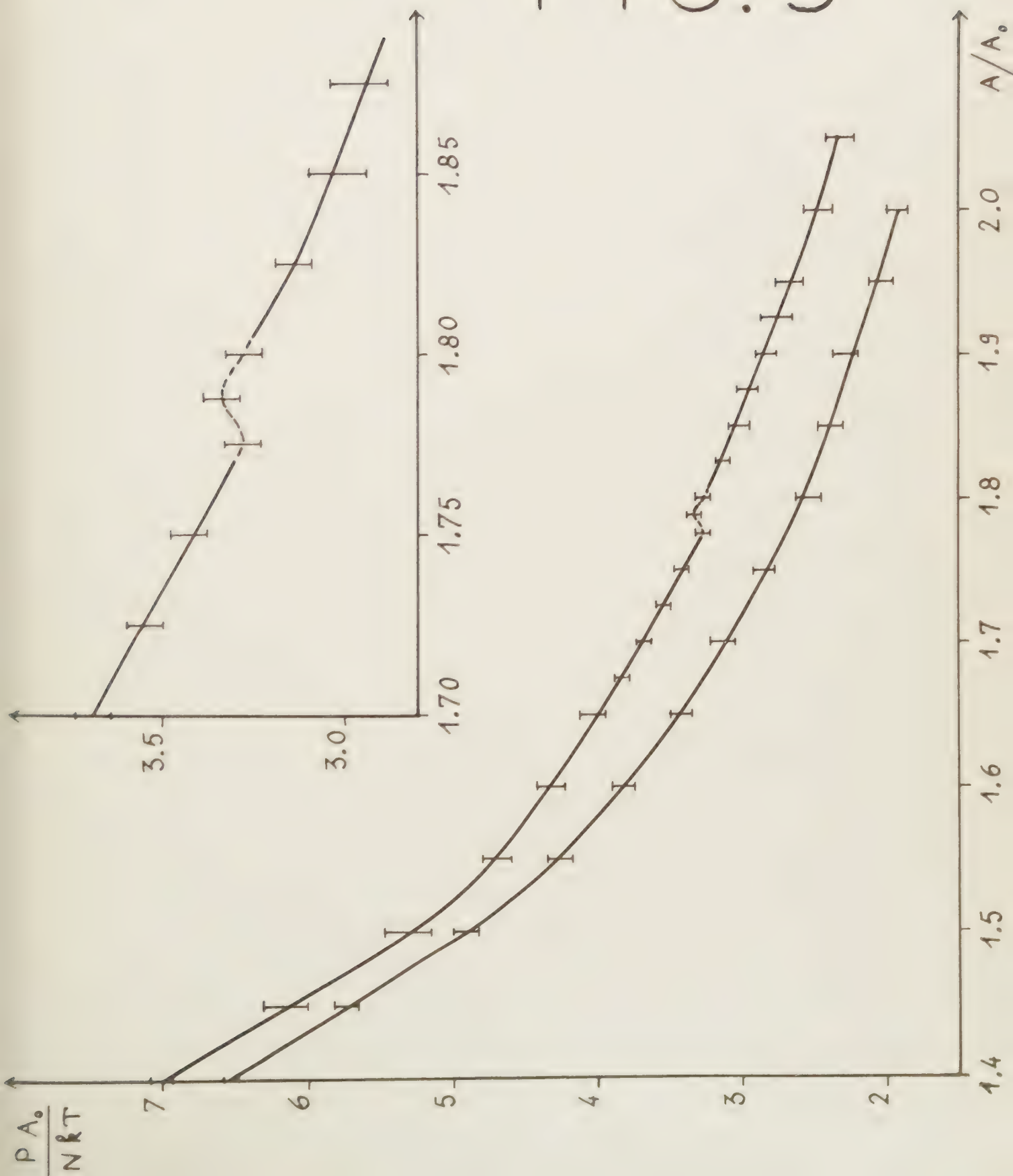


FIG. 6

